Reinhard März

Diss Frankfurt 1983

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Theorie der Ramanstreuung an elektronischen Plasmen hochangeregter, direkter Halbleiter

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik

der

Johann-Wolfgang Goethe Universität

in Frankfurt am Main

von

Reinhard März

aus Mailand (Italien)

Frankfurt am Main

August 1983

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereiches Physik der
Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main

Dekan	Prof.Dr. F. Granzer
1. Berichterstatter:	Prof.Dr. H. Haug
2. Berichterstatter:	Prof.Dr. L.L. Hirst
Tag der Promotion:	24.11.1983

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung 1

2. Zur Theorie der Ramanstreuung 11

2.1 Zeitabhängige Störungstheorie 15

2.2 ρA^2 - Streuung 18

2.3 $\vec{j}\vec{A}$ - Streuung 21

3. Die Auswirkungen der Bandstruktur 25

3.1 $\vec{k}\cdot\vec{p}$ Störungsrechnung 28

3.2 Die "einfachen" Matrixelemente 40

3.3 Die optischen Matrixelemente 44

4. Die Bewegungsgleichungen in RPA 49

4.1 Elektron-Elektron Wechselwirkung 50

4.2 Elektron-Phonon Wechselwirkung 53

5. Streuung durch die ρA^2-Kopplung 57

5.1 Intrabandstreuung 65

5.2 Intervalenzbandübergänge 86

6. Streuung durch die $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung 105

6.1 Rückwärtsstreuung 122

6.2 Orthogonale Polarisation 126

6.3 Komplanare Polarisation 131

7. Vergleiche mit dem Experiment 135

Anhang 145

A1. Eigenschaften der retardierten Greenschen Funktion 146

A2. Endliche Drehung von atomaren Wellenfunktionen 152

A3. Mitnahme von Relaxationszeiten 157

Referenzen 163

1. EINLEITUNG

Die Geschichte der Quantenmechanik ist untrennbar mit der Geschichte der Lichtstreuung verbunden. Bereits 1922 sagte Brillouin [1] Lichtstreuung an Schallwellen in Kristallen voraus. 1923 stellte Smekal [2] eine erste Theorie der Lichtstreuung an einem Zwei-Niveau-System auf. Kramers und Heisenberg [3] entwickelten 1925 eine Theorie des 2. Ordnungsprozesses. Diese Theorien enthielten bereits die wichtigsten Aussagen, die nötig sind, um die Experimente zu verstehen, die 1928 von Raman [4] , sowie von Landsberg und Mandelstam [5] ausgeführt wurden. Die inelastische Lichtstreuung - sie heißt heute Ramanstreuung - erwies sich in den folgenden Jahren als eine der stärksten Methoden, um elementare Anregungen in Atomen und Molekülen zu untersuchen. Ab 1940 versuchte man bereits Ramanstreuung an Kristallen durchzuführen, um ein besseres Verständnis der Gitterdynamik zu gewinnen. Die Messungen erwiesen sich jedoch als schwierig, da die differentiellen Wirkungsquerschnitte (Übergangsraten) sehr klein sind. Diese Situation änderte sich in den sechziger Jahren mit der Entdeckung des Lasers grundlegend, so daß bis heute in der Festkörperphysik unzählige Ramanexperimente zur Klärung der unterschiedlichsten Fragen gestartet worden sind.

Den Ausgangspunkt für die mikroskopische Berechnung des differentiellen Wirkungsquerschnittes bildet der Hamiltonoperator

$$H = H_0 + H_{Licht,el} + H_{Licht,ion} \qquad (1.1)$$

für das Gesamtproblem. Die Anteile $H_{Licht,el}$ und $H_{Licht,ion}$ werden im allgemeinen als Störungen im Sinne der zeitabhängigen Störungstheorie ver-

UNIV. LEIDEN BIBL.

standen.[1] Der Anteil H_0 des Hamiltonoperators beschreibt die Dynamik des unbeeinflußten Kristalls. An eine exakte Bestimmung seiner Eigenwerte ist nicht zu denken. Auch eine Vernachlässigung eines seiner Anteile ist wegen der ihnen gemeinsamen Coulombwechselwirkung unmöglich. Der Massenunterschied ($m_{ion} \gg m_{el}$) bewirkt jedoch, daß die Elektronen einer Bewegung der Ionen instantan folgen, während die Ionen den Bewegungen der Elektronen kaum Folge leisten.

Die chemische Bindung legt die Ruhelagen der Ionen in den Potentialmulden fest. Die Bewegung der Ionen sind dann in erster (harmonischer) Näherung Schwingungen um diese Ruhelagen, die natürlich quantisiert sind. Die Schwingungsquanten werden als Phononen bezeichnet. Man unterscheidet dabei zwischen akustischen Phononen - bei denen die Untergitter miteinander schwingen - und optischen Phononen - bei denen die Untergitter gegeneinander schwingen.

Die Bewegung der Elektronen wird im wesentlichen durch das von den Ruhelagen der Ionen ($m_{ion} \to \infty$) aufgebaute Potential bestimmt. Es trägt die Struktur des Gitters und wird folglich als gitterperiodisches Potential bezeichnet. Die atomaren Niveaus verbreitern bereits in dieser Näherung zu Bändern (Bändermodell). Daneben nehmen auch die Bewgungen der Ionen Einfluß auf die Dynamik der Elektronen. Diese Anteile äußern sich in einer Kopplung der Elektronen an die longitudinale Phononen (siehe zB. [8]).

---

[1] Eine weitere Methode der Behandlung [6], [7] ist mehr von der Elektrodynamik inspiriert, d.h. die gestreute Welle wird als Fernfeldlösung eines strahlenden Dipols aufgefasst. Die Ergebnisse sind mit den auf dem anderen Wege gefundenen identisch.

Um die Antwort des Elektronensystems im Kristall auf äußere Störungen zu untersuchen, muß man sich vergegenwärtigen, daß dem Elektron soviel Energie zugeführt werden, daß es nach dem Streuprozess wieder einen freien Zustand erreicht. Sind die Bänder komplett voll oder leer, so muß dem Elektron zumindest soviel Energie zugeführt werden, daß es die Lücke zum nächsten leeren Band überwinden kann (Interbandstreuung).[2] Im Grundzustand (T=0) unterscheidet man deshalb die voll besetzten Valenzbänder und die nicht ganz gefüllten Leitungsbänder. In Isolatoren und Halbleitern werden bei der chemischen Bindung die bindenden Valenzen abgesättigt, d.h. die Leitungsbänder sind im Grundzustand leer und je nach Größe der Bandlücke - das ist der energetische Abstand zwischen dem obersten Valenzband und dem untersten Leitungsband - ist der Kristall opaque oder transparent. Bei metallischer Bindung werden die bindenden Valenzen nicht abgesättigt, das unterste Leitungsband ist daher teilweise gefüllt. Die abschirmende Wirkung der Intrabandstreuung verleiht ihnen den typischen Glanz.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Ramanstreuuung an III-V Halbleitern untersucht. Bei der chemischen Bindung werden hierbei die p-Valenzen abgesättigt. Das oberste Valenzband ist also p-artig und das unterste Leitungsband s-artig. Diese Verbindungen kristallisieren in Zinkblendestruktur aus. Aus gruppentheoretischen Überlegungen kann man zeigen, daß in diesem Fall am Γ-Punkt ($\vec{k}$=0) die p-Valenzbänder Maxima und das s-Leitungsband ein Minimum annehmen. An dieser Stelle, an der die Elektronen direkt - d.h. ohne Vermittlung von Phononen - in das Leitungsband gelangen können, hat die Bandlücke ihr Minimum. Man bezeichnet derartige Substanzen als direkte Halbleiter ([10],[11]). Ramanstreuung an den

---

[2] Tatsächlich tritt bereits unterhalb der Bandlücke durch gebundene Zustände - Exzitonen,Biexzitonen - Absorption ein (siehe zB. [9]).

Elektronen dieser Substanzen kann man allerdings nur durchführen, wenn das Leitungsband teilweise gefüllt bzw. das Valenzband teilweise leer ist. Ist die Füllung der Bänder nicht zu stark, so macht sich die Bandstruktur nur in der Nähe des Γ-Punktes bemerkbar. Es reicht dann, die Bänder durch ihre Krümmung am Γ-Punkt zu berücksichtigen (effektive Massennäherung). Aus dieser Diskussion ergibt sich folgendes Bild.

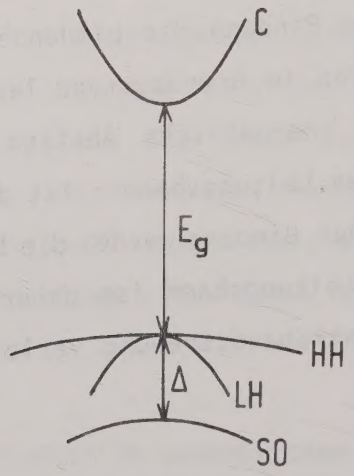


Abbildung 1.

Durch die Spin-Bahn-Kopplung ist ein Valenzband (SO) abgespalten. Die eingezeichneten Bänder sind jeweils zweifach entartet.

Eine teilweise Füllung der Bänder kann man durch das Einbringen von Fremdatomen erreichen, wobei die Ladungsträgerkonzentration dann im wesentlichen durch die Stärke der Dotierung geregelt wird. Die ersten Ramanexperimente an Halbleiterplasmen in hochdotiertem GaAs wurden von Mooradian und Wright 1966 [12] durchgeführt. In weiteren Experimenten wurde das Phänomen genauer untersucht, wobei man durch das Einbringen von Donatoren die Ramanstreuung im Leitungsband ([13]-[18]) und durch das Einbringen von Akzeptoren die Ramanstreuung in den Valenzbändern

([19]-[21]) betrachtet hat.[3] In den Experimenten - Abbildung 2 auf Seite 5 zeigt historische Messungen von Mooradian und Wright [12] - finden wir in der Nähe der Laserlinie zunächst die Zone der Intrabandanregungen (SPE), deren Grenze durch das Pauli-Prinzip gegeben ist.

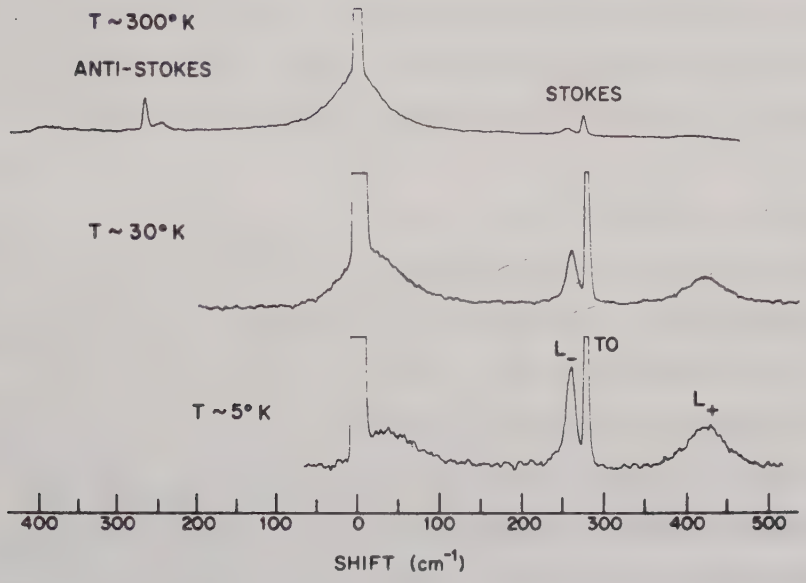


Abbildung 2. Ramanspektren

Daneben sind aber auch scharfe Moden zu erkennen. Sie rühren zum einen von kollektiven Schwingungen des Elektronengases, den PLasmonen (PL), zum anderen von den longitudinalen Phononen (LO), die durch die

---

[3] Ein Nachteil dieser Methode ist die Streuung der Elektronen an den eingebrachten Störstellen. Dieser Effekt wird im allgemeinen durch das Einführen von phänomenologischen Relaxationszeiten berücksichtigt (siehe Anhang A3).

Elektron-Phonon-Wechselwirkung sichtbar werden, her.[4] Desweiteren werden die TO-Phononen durch die Kopplung des Lichtfeldes an die Ionen sichtbar [22]. Es war anfangs etwas verwunderlich, daß die Einteilchenspektren so stark waren, man bemerkte jedoch rasch, daß bei orthogonaler Polarisation nur noch die Einteilchenspektren zu sehen waren, in paraller Polarisation jedoch die kollektiven Moden dominierten. Theoretische Untersuchungen ([23]-[32]) zeigten, daß bei orthogonaler Polarisation die $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung für die Ramanspektren verantwortlich ist, während sie in paralleler Polarisation durch die ρA^2-Kopplung verursacht werden.

Eine weitere Methode, um eine teilweise Füllung der Bänder zu erzwingen, besteht in Hochanregungsexperimenten ([33]-[36]). Durch starkes Pumpen werden hierbei Elektronen aus den Valenzbändern ins Leitungsband befördert. Da die Intrabandstreuprozesse auf einer wesentlich schnelleren Zeitskala als die Rekombinationsprozesse ablaufen, bildet sich in solchen Experimenten ein stationärer Nichtgleichgewichtszustand heraus, der sich durch thermodynamisches Gleichgewicht innerhalb der Bänder auszeichnet. Es liegt dann Ramanstreuung an einem zweikomponentigen elektronischen Plasma , einem Elektron-Loch-Plasma, vor. Diese Tatsache wirkt auf den ersten Blick nicht gerade glücklich, der Vorteil der Methode besteht jedoch darin, daß hochreine Materialien verwendet werden können. Die dämpfenden Einflüsse auf die Spektren sollten daher rein intrinsischen Charakter haben (keine Störstellenstreuung). Neben dem Zerfall der kollektiven Moden in Intrabandanregungen (Landau-Dämpfung [64]) wird in dieser Arbeit auch der Zerfall in Intervalenzbandanregungen (HH-LH) untersucht. Es zeigt sich dabei, daß durch die Einbeziehung dieser Effekte Ramanexperimente, bei denen das Plasma durch 2-Photonenabsorption erzeugt

---

[4] Sind die Energien der beiden Moden in etwa gleich, so stoßen sich die beiden Plasmon-Phonon-Moden ab.

wird, ohne jegliche Anpassparameter - Temperatur und Dichte sind aus Lumineszenzmessungen bekannt - in RPA sehr gut erklärt werden können [37]. In Experimenten, bei denen das Plasma durch direkte Absorption erzeugt wird, ist die Übereinstimmung nicht ganz so gut. Es können jedoch die Spektren in paralleler und orthogonaler Polarisation gleichzeitig ohne Fitparameter erklärt werden. Der Grund für die schlechtere Übereinstimmung dürfte seine Ursache in räumlichen Inhomogenitäten innerhalb des Plasmas haben. Mehrstrahlexperimente, bei denen das Plasma von einem separaten Pumpstrahl erzeugt wird, sind bislang noch nicht durchgefürt worden.

In dieser Arbeit werden wir zunächst zeigen (Abschnitt 2), daß die ρA^2-Kopplung in 1.Ordnung der zeitabhängigen Störungstheorie resonant wird. Das Ramanspektrum wird in diesem Fall durch die Fouriertransformierte der Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion bestimmt. Durch Anwendung des Dissipations-Fluktuations-Theorems führen wir die Korrelationsfunktion auf die retardierte Greensche Funktion zurück. Einige Eigenschaften der retardierten Greenschen Funktion werden im Anhang A1 entwickelt.[5] Die $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung wird erst in 2.Ordnung der zeitabhängigen Störungstheorie resonant. Die Berechnung der Übergangsraten und damit des differentiellen Wirkungsquerschnittes führt in diesem Fall auf 3-fach retardierte Greensche Funktionen. In Abschnitt 3 wird zunächst eine effektive Massennäherung der Bandstruktur in der Nähe des Γ-Punktes

---

[5] Dieses Verfahren ist im Rahmen der vorliegenden Arbeit sinnvoll, da RPA zur Erklärung der Experimente ausreicht. Auf dem RPA-Niveau sind aber die retardierten und die zeitgeordneten Greenschen Funktionen völlig gleichwertig. Bei weitergehenden graphentheoretischen Entwicklungen sind die zeitgeordneten Greenschen Funktionen von Vorteil (siehe zB. [8]).

durchgeführt, mit deren Hilfe die für die Ramanstreuung relevanten Matrixelemente aus den experimentell zugänglichen Bandparamtern berechnet werden können. In Kapitel 3.1 werden die "einfachen" Matrixelemente $\langle\lambda k|\lambda' k+q\rangle$ berechnet, die für die Streuung über die ρA^2-Kopplung entscheidend sind. Die Ergebnisse von Combescot und Nozieres [53] werden reproduziert. In Kapitel 3.2 werden die für die Streuung über die $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung wichtigen Matrixelemente berechnet. Die Ergebnisse gehen über die von Hamilton und McWhorter [31] gefundenen hinaus, da im Rahmen dieses Kapitels die Impulsabhängigkeiten der Matrixelemente mitberücksichtigt werden. In Abschnitt 4 wird die Bewegungsgleichung für den allgemeinen Strom unter Berücksichtigung der Elektron-Elektron- und der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in RPA aufgestellt. Anschließend wird die ρA^2-Kopplung behandelt (Abschnitt 5). Nachdem zunächst ein allgemeiner Ausdruck für die retardierte Greensche Funktion hergeleitet wird[6] , werden in Kapitel 5.1 die Einflüsse der Intrabandstreuprozesse behandelt. Da in Hochanregungsexperimenten die Dichte durch Verändern der Laserleistung leicht beeinflußt werden kann, stehen im Rahmen dieses Kapitels die Auswirkungen der Dichte im Mittelpunkt der Überlegungen. In Kapitel 5.2 werden die dämpfenden Einflüsse der Intervalenzbandstreuprozesse untersucht. Dabei wird über die Arbeiten von Combescot und Nozieres [53] sowie von Aldrich und Silver [54] hinausgehend eine detaillierte Untersuchung der Anregungsspektren durchgeführt. Für $q=0$ werden analytisch berechnete und für $q\neq 0$ numerisch berechnete Ergebnisse vorgelegt. In Abschnitt 6 wird die Ramanstreuung über die $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung untersucht. Zunächst wird wiederum ein Ausdruck für den differentiellen Wirkungsquerschnitt hergeleitet, wobei sich zeigt, daß die Elektron-Elektron und die Elektron-Phonon Wechselwirkung wegen der Auswahlregeln praktisch wirkungslos sind, d.h.

---

[6] Es handelt sich hierbei um eine Verallgemeinerung der Formel von Zubarev [51]

die Abschirmung ist nicht wirksam. Da im Rahmen dieser Arbeit erstmals die Impulsabhängigkeiten der Matrixelemente einbezogen wurde, wird eine komplette Neuberechnung der Spektren notwendig. In den Kapiteln 6.1-6.3 werden Ergebnisse in verschiedenen experimentellen Situationen angegeben. In Abschnitt 7 werden Vergleiche mit Experimenten durchgeführt. Dabei wird auf das Einführen von phänomenologischen Dämpfungen verzichtet. In nichtresonanten Einstrahlexperimenten $\omega_L < E_g$ ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment. In resonanten Einstrahlexperimenten ist die Übereinstimmung nicht ganz so gut, die Anteile in paralleler (ρA^2-Kopplung) und die in orthogonaler Polarisation ($\vec{j}\vec{A}$-Kopplung) können jedoch simultan erklärt werden.

2. ZUR THEORIE DER RAMANSTREUUNG

Im folgenden Abschnitt wird eine Theorie der Ramanstreuung auf der Basis der zeitabhängigen Störungstheorie entwickelt. In Kapitel 2.2 zeigt sich, daß für die ρA^2-Kopplung die Suche nach der Übergangsrate auf die Berechnung der Dichte-Dichte Korrelationsfunktion führt. Durch die Anwendung des Dissipations-Fluktuations Theorems (siehe Anhang A1) wird die Korrelationsfunktion durch die zugehörige retardierte Greensche Funktion ersetzt. Derselbe Weg wurde bereits 1968 von Wolff [30] beschritten. In Kapitel 2.3 zeigt sich, daß eine analoge Prozedur für die $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung (2.Ordnung) auf 3-fach retardierte Greensche Funktionen führt.

In der klassischen Mechanik wird die (elastische) Streuung eines Teilchens an einem Streuzentrum vollständig durch seine Geschwindigkeit und den Stoßparameter charakterisiert.

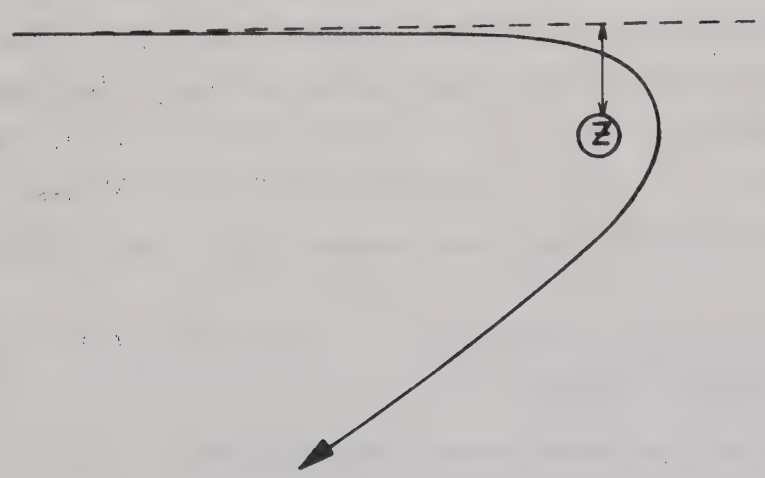


Abbildung 3.

In der Quantenmechanik verliert aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelationen die Frage nach der Bahn ihren Sinn. Das Ziel der Theorie besteht nun darin, die Wahrscheinlichkeit dafür zu berechnen, daß ein Teilchen um den Winkel θ abgelenkt wird und dabei die Energie ΔE mit dem System austauscht.

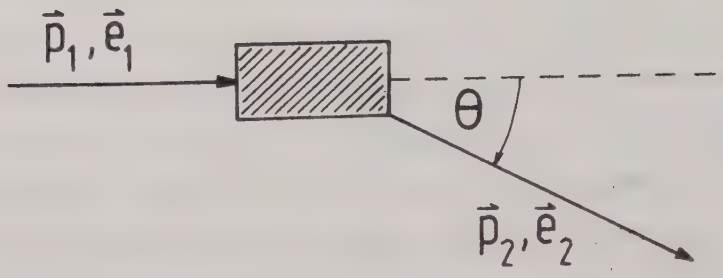


Abbildung 4.

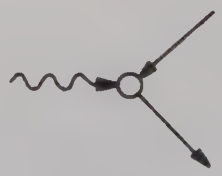
Das Streuexperiment mit Photonen im Bereich des sichtbaren Lichtes (eV) wird als Ramanstreuung [4] bezeichnet und zwar je nach dem, ob das Lichtfeld Energie an das System abgibt oder von ihm aufnimmt, als Stokes- oder Antistokes-Streuung.

Für den Hamiltonoperator des Gesamtsystems gilt somit (siehe zB. [40],[41])

$$H = H_0 + H_{\vec{j}\vec{A}} + H_{\rho A^2} \tag{2.1}$$

H_0 beschreibt das voll wechselwirkende atomare System.

$$H_{\vec{j}\vec{A}} = \frac{1}{c} \int d^3r \, \vec{j} \cdot \vec{A} \tag{2.2}$$



$$H_{\rho A^2} = \frac{e}{2mc^2} \int d^3r \, \rho A^2 \qquad (2.3)$$

Es wird im Rahmen dieser Arbeit darauf ankommen, die Einflüße der beiden konkurrierenden Streuprozesse $H_{\vec{j}\vec{A}}$ und $H_{\rho A^2}$ zu vergleichen.

Schaltet man nun im Experiment den Laser ein, so wird eine gewisse Zeit ($\approx 10^{-10}$sec) vergehen, bis sich das System im "eingeschwungenen Zustand" befindet, d.h. die Übergangsrate - das ist die Anzahl der Übergänge $[(\vec{p}_1,\vec{e}_1)\to(\vec{p}_2,\vec{e}_2)]$/Zeiteinheit - unabhängig von der Zeit ist.[7] Der stationäre Zustand selbst ist, asymptotische Stabilität vorausgesetzt, unabhängig von der Art des Einschaltvorganges, und so wird in der Theorie zumeist das "adiabatische" Einschalten der Störung bevorzugt, da hierbei sämtliche Einschwingvorgänge [42] ausgedämpft werden. Wenn in den untersuchten Experimenten die Prozesse der spontane Emission keine Rolle spielen - was in dieser Arbeit der Fall ist -, so kann man die Lichtfelder getrost klassisch behandeln. Überdies muß man vom Laserfeld $(\vec{p}_1,\vec{e}_1)$ nur den einfallenden Teil und vom Streufeld $(\vec{p}_2,\vec{e}_2)$ nur den ausgehenden Teil mitberücksichtigen.

Wir wählen also das folgende klassische Vektorpotential[8]

---

[7] Für den Einschwingvorgang selbst interessiert man sich in zeitaufgelösten Messungen, zB. der Picosekundenspektroskopie.

[8] Es ist im folgenden immer der Limes $\gamma \to 0^+$ zu nehmen.

$$\vec{A}(t) = e^{\gamma t}\left[\vec{A}_1 e^{i(\vec{p}_1\vec{r}-\omega_1 t)} + \vec{A}_2^{*} e^{-i(\vec{p}_2\vec{r}-\omega_2 t)}\right] \qquad (2.4)$$

wobei $$\omega_i = \frac{\hbar c\,|\vec{p}_i|}{\sqrt{\epsilon_\infty}} \qquad (2.4a)$$

und wegen der Coulombeichung ($\partial_\alpha E_\alpha = 0$)

$$\vec{A}_i = \frac{i c \vec{E}_i}{2\omega_i} \qquad (2.4b)$$

ist. Die Aufmerksamkeit dieser Arbeit gilt der Ramanstreuung an elektronischen Plasmen.[9] Die übertragenen Energien liegen hier im Bereich der Intrabandstreuprozesse (meV). Die Lichtfelder hingegen liegen im Bereich des sichtbaren Lichtes (eV). Die in den Streuprozessen resonanten Terme müssen also die Differenzfrequenz $\Delta\omega=\omega_1-\omega_2$ enthalten. Das trifft insbesondere auf das Vektorpotential A nicht zu. Der lineare Term $H_{\vec{j}\vec{A}}$ wird daher nicht in 1.Ordnung resonant. Betrachtet man den Vertex (2.2), so ist das auch durchaus verständlich. Er zeigt ja einen Absorptionsprozess. Da aber

$$A^2 = e^{2\gamma t}\left[A_1^2 e^{2i(\vec{p}_1\vec{r}-\omega_1 t)} + A_2^2 e^{-2i(\vec{p}_2\vec{r}-\omega_2 t)} + 2\vec{A}_1\vec{A}_2^{*} e^{i[(\vec{p}_1-\vec{p}_2)\vec{r}-(\omega_1-\omega_2)t]}\right] \qquad (2.5)$$

ist, wird wegen des dritten Beitrages der quadratische Term $H_{\rho A^2}$ sehr wohl resonant ($\Delta\vec{p}=\vec{p}_1-\vec{p}_2$, $\Delta\omega=\omega_1-\omega_2$).

$$H_{\rho A^2} \approx H_{\rho \vec{A}_1\vec{A}_2} = \frac{e}{mc^2}\,\rho(\vec{p}_1-\vec{p}_2)\,\vec{A}_1\vec{A}_2^{*}\, e^{\gamma t}\, e^{-i(\omega_1-\omega_2)t} \qquad (2.6)$$

---

[9] Wir betrachten deshalb eine Kopplung an die elektronischen Anteile der Polarisation. Eine Kopplung an die ionischen Anteile der Polarisation liefert die Phonon- Polaritonen (siehe Anhang A4).

2.1 ZEITABHÄNGIGE STÖRUNGSTHEORIE

Das gesamte Experiment wird in der Theorie vom Blickwinkel des atomaren Systems aus betrachtet. Zu Beginn des Experiments befindet sich das atomare System mit der Wahrscheinlichkeit P_i im Zustand $|\psi(-\infty)>$. P_i wird dabei üblicherweise eine thermodynamische Gleichgewichts- oder zumindest Quasigleichgewichtsverteilung sein. $W_{i\to f}(t)$ gibt an, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, daß das atomare System bis zur Zeit t in den Zustand $|\psi_f(t)>$ übergegangen sein wird. Für die Übergangsrate gilt

$$\dot{W}_{1\to 2}(t) = \frac{d}{dt}\left\{\sum_i P_i \sum_f W_{i\to f}\right\} \tag{2.7}$$

und im stationären Fall

$$\dot{W}_{1\to 2}(\infty) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \sum_i P_i \sum_f W_{i\to f}(t) \tag{2.8}$$

mit

$$W_{i\to f}(t) = \left|<\psi_f(t)|\,\phi(t)>\right|^2, \quad |\psi_i(-\infty)> = |\phi(-\infty)> \tag{2.8a}$$

Während $<\psi_f(t)|$ ein propagierender Eigenzustand zu H_0 ist, wird die Zeitentwicklung von $|\Phi(t)>$ durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar\,|\dot{\phi}(t)> = \left(H_0^S + V^S(t)\right)|\phi(t)>$$

mit der Anfangsbedingung

$$|\phi(-\infty)> = |\psi_i(-\infty)> \tag{2.9}$$

determiniert. $V^S(t)$ ist hierbei je nach Streuprozess $H_{\vec{j}\vec{A}}$ oder $H_{\rho A^2}$. Zur Berechnung von $|\Phi(t)>$ läßt man sich von störungstheoretischen Gedanken leiten, d.h.

$$|\phi(t)> = \sum_k a_k(t)\,|\psi_k(t)> \tag{2.10}$$

Für den Fall, daß die Störung klein ist, sollten dem Anfangszustand $|\psi_k(-\infty)\rangle$ nur "langsam" - langsam im Vergleich zur Grundfrequenz - andere Eigenzustände beigemischt werden. Die Entwicklungskoeffizienten $a_k(t)$ sind dann nur schwach zeitabhängig.

Da H_0^s vollständig zeitunabhängig ist, wird die Lösung der Schrödingergleichung für einen Eigenzustand $|\psi_k(t)\rangle$ trivial.

$$i\hbar\, |\dot{\psi}_k(t)\rangle = H_0\, |\psi_k(t)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad |\psi_k(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}\, |k\rangle$$

$$= e^{-i\omega_k t}\, |k\rangle$$

mit $\quad H_0\, |k\rangle = \hbar\omega_k\, |k\rangle \qquad (2.11)$

Bedenkt man desweiteren, daß

$$\langle \psi_f(t) | V^s(t) | \psi_i(t) \rangle = \langle f | V(t) | i \rangle \qquad (2.12)$$

ist, wobei[10] $\quad V(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t}\, V^s(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \qquad (2.13)$

den Störoperator im Wechselwirkungsbild darstellt, so gewinnt man eine Integro-Differential-Gleichung für die Entwicklungskoeffizienten $a_f(t)$

---

[10] Im weiteren sind alle Operatoren im Wechselwirkungsbild zu nehmen.

$$i\hbar\, \dot{a}_f(t) = \sum_k \langle f | V(t) | k \rangle\, a_k(t)$$

mit $$a_k(-\infty) = \delta(k,i) \qquad (2.14)$$

die zur Gleichung (2.9) äquivalent ist. Die Übergangsrate (2.8a) ist jetzt einfach

$$W_{i\to f}(t) = |a_f(t)|^2$$

Die Gleichung (2.14) läßt sich wegen der schwachen Zeitabhängigkeit der Koeffizienten $a_f(t)$ durch Iteration lösen, also

$$a_f^{(\alpha+1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt' \sum_k \langle f | V(t') | k \rangle\, a_k^{(\alpha)}$$

$$a_f^{(0)} = \delta(f,i)$$

$$a_f = \sum_\alpha a_f^{(\alpha)} \qquad (2.15)$$

Man sieht, daß in der n.Iterierten das Potential in der n.Potenz auftritt.

2.2 ρA^2 - STREUUNG

In der ρA^2-Streuung ist der führende Beitrag breits proportional zu $\exp[-(\omega_1-\omega_2)t]$, wie wir ja bereits gesehen hatten. Es genügt in diesem Fall die 1.Ordnung (1.Iterierte) zu berechnen. Zunächst muß jedoch, um den Verhältnissen im Festkörper gerecht zu werden, die Dichte der Elektronen $\rho(\vec{q})$ nach Blochfunktionen entwickelt werden.

$$\rho(\vec{q}) = e \int d^3r\, e^{i\vec{q}\vec{r}}\, \Psi^+(r)\, \Psi(r)$$

$$= e \sum_{\substack{kk' \\ \lambda\lambda'}} c^+_{\lambda k}\, c_{\lambda' k'}\, \frac{1}{V} \int d^3r\, \varphi^*_{\lambda k}(\vec{r})\, e^{i\vec{q}\vec{r}}\, \varphi_{\lambda' k'}(\vec{r})$$

$$= e \sum_{\substack{kk'Q \\ \lambda\lambda'}} c^+_{\lambda k}\, c_{\lambda' k'}\, \frac{1}{V} \int_{BZ} d^3r\, u^*_{\lambda k}(\vec{r})\, e^{i\vec{Q}\vec{r}}\, u_{\lambda' k'}(\vec{r})\, \delta(\vec{k}, \vec{k}' + \vec{Q} + \vec{q})$$

Ohne Berücksichtigung der Umklapprozesse ergibt sich

$$\rho(\vec{q}) \approx e \sum_{\substack{k \\ \lambda\lambda'}} J_{\lambda\lambda'}(k+q, k) \qquad (2.16)$$

mit

$$J_{\lambda\lambda'}(k+q, k) = \langle \lambda k+q \,|\, \lambda' k \rangle\, c^+_{\lambda k+q}\, c_{\lambda' k} \qquad (2.17)$$

Die Fouriertransformierte der Dichte ist im wesentlichen durch den gesamten Interbandstrom bestimmt. Wegen (2.6) sieht das zeitabhängige Potential wie folgt aus ($\Delta\omega=\omega_1-\omega_2$, $\Delta\vec{p}=\vec{p}_1-\vec{p}_2$)

$$V(t) = \sigma(t)\, e^{-i(\Delta\omega + i\gamma)t} \qquad (2.18)$$

wobei

$$v(t) = \frac{e}{mc^2}\, \rho(\vec{\Delta p}\,|t)\; \vec{A}_1 \cdot \vec{A}_2^{\,*}$$

$$= \alpha_1 \alpha_2 \; \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2^{\,*} \sum_{\substack{k \\ \lambda\lambda'}} \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(\vec{k}+\vec{\Delta p}, \vec{k}\,|t) \qquad (2.19)$$

mit $$\alpha_i = \frac{e}{2\sqrt{m}\;\omega_i} \qquad (2.20)$$

natürlich im Schrödingerbild zeitunabhängig ist. Für die Übergangswahrscheinlichkeit/Zeiteinheit ergibt sich mit

$$a_f^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{-i(\Delta\omega + i\gamma)t'} \langle f | v(t') | i \rangle \qquad (2.21)$$

$$\dot{W}_{1\to 2}^{(1)} = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{\hbar^2 t} \int_{-\infty}^{t} dt_1 dt_2\, e^{\gamma_1 t_1 + \gamma_2 t_2}\, e^{i\Delta\omega(t_1 - t_2)} \langle v(t_1)^+ v(t_2) \rangle_T$$

$$= \lim_{t\to\infty} \frac{1}{\hbar^2 t} \int_{-\infty}^{t} dt_1\, e^{\Gamma t_1} \int_{-\infty}^{t-t_1} d\tau\, e^{i(\Delta\omega + i\gamma)\tau} \langle v(\tau)^+ v(0) \rangle_T$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt\; e^{i(\Delta\omega + i\gamma)t} \langle v(t)^+ v(0) \rangle_T \qquad (2.22)$$

mit

$$\lim_{\substack{t\to\infty \\ \Gamma\to 0^+}} \frac{1}{t} \int dt'\; e^{\Gamma t'} = 1$$

Durch Anwendung des Dissipations-Fluktuations-Theorems (A1.10) zeigt sich schließlich, daß die Übergangsrate im wesentlichen durch den Imaginärteil der retardierten Greenschen Funktion gegeben ist.

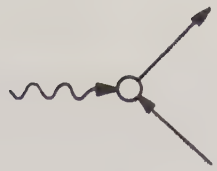
$$\dot{W}^{(1)}_{1\to 2} = \frac{2}{\pi\hbar}\,\frac{1}{e^{-\beta\Delta\omega}-1}\;\mathrm{Im}\,\langle\langle v(t)^{+}\,|\,v(0)\rangle\rangle_{\Delta\omega+i\gamma} \qquad (2.23)$$

Es ist an dieser Stelle genaugenommen nicht einzusehen, warum ein Wechsel von der Korrelationsfunktion zur retardierten Greenschen Funktion notwendig ist. Es erweist sich jedoch in späteren Rechnungen als sehr nützlich, auf diese Weise eine Inhomogenität im Fourierspektrum erzeugt zu haben.

$$\dot{W}^{(1)}_{1\to 2} = \frac{2\alpha_1^2\alpha_2^2}{\pi\hbar}\,\frac{|\vec{E}_1\cdot\vec{E}_2^{*}|^2}{e^{-\beta\Delta\omega}-1}\cdot\mathrm{Im}\sum_{\substack{k_1k_2\\ \lambda_1\ldots\lambda_4}}\langle\langle \mathcal{F}_{\lambda_1\lambda_2}(k_1,k_1+\Delta p|t)\,|\,\mathcal{F}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2,k_2-\Delta p)\rangle\rangle_{\Delta\omega+i\gamma}$$

$$(2.24)$$

2.3 $\vec{j}\vec{A}$ - STREUUNG



Für die $\vec{j}\vec{A}$-Streuung müssen wir zunächst den Stromoperator $\vec{j}(\vec{q})$ nach Blochfunktionen entwickeln.

$$\vec{j}(\vec{q}) = \int d^3r \, e^{i\vec{q}\vec{r}} \, \vec{j}(\vec{r}) \tag{2.25}$$

$$= \frac{e}{2m} \int d^3r \, e^{i\vec{q}\vec{r}} \left\{ \Psi^+ (\vec{p}\,\Psi) + (\vec{p}\,\Psi^+)\Psi \right\}$$

$$= \frac{e}{2m} \sum_{\substack{kk' \\ \lambda\lambda'}} c^+_{\lambda k} c_{\lambda' k'} \frac{1}{V} \int d^3r \, e^{i\vec{q}\vec{r}} \left\{ \varphi^*_{\lambda k} (\vec{p}\,\varphi_{\lambda' k'}) + (\vec{p}\,\varphi^*_{\lambda k}) \varphi_{\lambda' k'} \right\}$$

Ohne die Berücksichtigung der Umklapprozesse finden wir

$$\vec{j}(\vec{q}) = \frac{e}{m} \sum_{\substack{k \\ \lambda\lambda'}} \langle \lambda k+q | \vec{p} | \lambda' k \rangle \, c^+_{\lambda k+q} \, c_{\lambda k} \tag{2.26}$$

Die jA-Streuung H_{jA} ist linear im Vektorpotential A und kann erst in 2.Ordnung Störungstheorie resonant werden. Als zeitabhängiges Potential V(t) ergibt sich

$$V(t) = e^{\gamma t} \left[W_1(t) \, e^{-i\omega_1 t} + W_2(t)^+ e^{i\omega_2 t} \right]$$

wobei aus

$$W_i(t) = \frac{1}{c} \, \vec{j}(\vec{p}_i | t) \cdot \vec{A}_i$$

$$= i \, \alpha_i \sum_{\substack{k \\ \lambda\lambda'}} \overset{\approx}{j}_{\lambda\lambda'} (k+q, k | t) \tag{2.28}$$

mit

$$\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda\lambda'}(k+q,k) = \vec{E}_i \cdot \langle \lambda k+q | \vec{p}/\sqrt{m} | \lambda' k \rangle \, c^{+}_{\lambda k+q} \, c_{\lambda' k}$$

wiederum die expliziten Zeitableitungen eliminiert wurden. Es ergibt sich:

$$a_f^{(2)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt_1 \, e^{\gamma_1 t_1} \sum_k \langle f | W_1(t_1) e^{-i\omega_1 t_1} + W_2(t_1)^{+} e^{i\omega_2 t_1} | k \rangle \, a_k^{(1)}(t_1)$$

$$a_k^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt_2 \, e^{\gamma_2 t_2} \langle k | W_1(t_2) e^{-i\omega_1 t_2} + W_2(t_2)^{+} e^{i\omega_2 t_2} | i \rangle$$

also

$$a_f^{(2)} = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{t} dt_1 \, e^{(\gamma_1+\gamma_2)t_1} e^{-i(\omega_1-\omega_2)t_1} \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \, e^{-\gamma_2(t_1-t_2)} \cdot$$

$$\cdot \langle f | e^{i\omega_1(t_1-t_2)} W_2(t_1)^{+} W_1(t_2) + e^{-i\omega_2(t_1-t_2)} W_1(t_1) W_2(t_2)^{+} | i \rangle$$

$$= \langle f | \int_{-\infty}^{t} dt_1 \, e^{-i(\Delta\omega + i\Gamma)t_1} \left\{ \left[\!\left[W_2(t_1)^{+} W_1(t_1-\tau) \right]\!\right]_{\omega_1+i\gamma} + \left[\!\left[W_1(t_1) W_2(t_1-\tau)^{+} \right]\!\right]_{-\omega_2+i\gamma} \right\} | i \rangle \qquad (2.29)$$

wobei

$$\left[\!\left[W_2(t_1)^{+} W_1(t_1-\tau) \right]\!\right]_{\omega_1+i\gamma} = \int_0^{\infty} d\tau \, e^{i(\omega_1+i\gamma)\tau} W_2(t_1)^{+} W_1(t_1-\tau) \qquad (2.30)$$

die Fouriertransformierte eines retardierten Operators beschreibt. Für die Übergangsrate ergeben sich in 2.Ordnung damit 4 Terme. Mithilfe des Dissipations-Fluktuations-Theorems läßt sich das Ergebnis durch 3-fach retardierte Greensche Funktionen beschreiben.[11]

$$\dot{W}^{(2)}_{1\to 2} = \frac{2}{\pi\hbar}\,\frac{1}{e^{-\beta\Delta\omega}-1}\,\cdot$$

$$\cdot\,\mathrm{Im}\Big\{ \langle\langle W_1(t-\tau_1)^+ W_2(t) \,|\, W_2(0)^+ W_1(0-\tau_2)\rangle\rangle_{-\omega_1,\omega_1,\Delta\omega} +$$

$$+ \langle\langle W_1(t-\tau_1)^+ W_2(t) \,|\, W_1(0)\, W_2(0-\tau_2)^+\rangle\rangle_{-\omega_1,-\omega_2,\Delta\omega} +$$

$$+ \langle\langle W_2(t-\tau_1)\, W_1(t)^+ \,|\, W_1(0)\, W_2(0-\tau_2)^+\rangle\rangle_{\omega_2,-\omega_2,\Delta\omega} +$$

$$+ \langle\langle W_2(t-\tau_1)\, W_1(t)^+ \,|\, W_2(0)^+ W_1(0-\tau_2)\rangle_{\omega_2,\omega_1,\Delta\omega} \Big\} \qquad (2.31)$$

und mit (2.28) finden wir schließlich

---

[11] Die erste Frequenz beschreibt dabei die Fouriertransformation bezüglich der Zeit τ_1, die zweite Frequenz bezüglich der Zeit τ_2 und die dritte bezüglich der Zeit t. Ansonsten ist die Notation wie bei Zubarev [73] gewählt.

$$\dot{W}^{(2)}_{1\to 2} = \frac{2}{\pi\hbar}\,\frac{1}{e^{-\beta\Delta\omega}-1}\cdot \mathrm{Im}\sum_{\substack{k_1\ldots k_4\\ \lambda_1\ldots\ldots\lambda_8}} \cdot$$

$$\cdot\Big\{\ll \tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_8\lambda_7}(k_4,k_4+q_1|t-\tau_1)\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_6\lambda_5}(k_3,k_3-q_2|t)\,\Big|\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_4\lambda_3}(k_2,k_2-q_2|0)\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1,k_1+q_1|0-\tau_2)\gg_{-\omega_1,\omega_1,\Delta\omega}+$$

$$+\ll \tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_8\lambda_7}(k_4,k_4+q_1|t-\tau_1)\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_6\lambda_5}(k_3,k_3-q_2|t)\,\Big|\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_4\lambda_3}(k_2,k_2+q_1|0)\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1,k_1-q_2|0-\tau_2)\gg_{-\omega_1,-\omega_2,\Delta\omega}+$$

$$+\ll \tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_8\lambda_7}(k_4,k_4-q_2|t-\tau_1)\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_6\lambda_5}(k_3,k_3+q_1|t)\,\Big|\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_4\lambda_3}(k_2,k_2+q_1|0)\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1,k_1-q_2|0-\tau_2)\gg_{\omega_2,-\omega_2,\Delta\omega}+$$

$$+\ll \tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_8\lambda_7}(k_4,k_4-q_2|t-\tau_1)\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_6\lambda_5}(k_3,k_3+q_1|t)\,\Big|\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_4\lambda_3}(k_2,k_2-q_2|0)\,\tilde{\tilde{\mathcal{J}}}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1,k_1+q_1|0-\tau_2)\gg_{\omega_2,\omega_1,\Delta\omega}\Big\} \quad (2.32)$$

3. DIE AUSWIRKUNGEN DER BANDSTRUKTUR

Es hat sich in den vergangenen Jahren gezeigt, daß die Entwicklung beider, Dichte und Strom, auf allgemeine Ströme im Inneren des Kristalls führen. Das Ziel dieses Abschnittes ist es, für III-V Halbleiter Zusammenhänge zwischen den Matrixelementen und den experimentell gut zugänglichen Bandparametern herzustellen (Kapitel 3.1). In Kapitel 3.2 werden die "einfachen" Matrixelemente $\langle\lambda k+q|\lambda' k\rangle$ berechnet, die für die Streuung bei ρA^2-Kopplung verantwortlich sind. Dabei werden die Ergebnisse von Combescot und Nozieres [53] reproduziert. Darüberhinaus zeigt sich, daß bei den Interband - Übergängen wegen der Auswahlregeln nur die Matrixelemente $\langle HH,k|LH,k+q\rangle$ eine Rolle spielen. In Kapitel 3.3 werden die für die jA-Kopplung wichtigen optischen Matrixelemente $\langle\lambda k+q|p|\lambda' k\rangle$ berechnet. Im Unterschied zu der Arbeit von Hamilton und McWhorter [31] werden hierbei die Impulsabhängigkeiten der Matrixelemente berücksichtigt.

In III-V Verbindungen werden bei der chemischen Bindung die p-Orbitale abgesättigt. Infolge der Gitterperiodizität des Kristalls werden die Zustände zu Bändern verbreitert, so daß im Grundzustand (T=0) das oberste Valenzband (p-artig) vollständig gefüllt ist, während das unterste Leitungsband (s-artig) leer bleibt. Wie man aus gruppentheoretischen Überlegungen [11] für Zinkblendestruktur zeigen kann, gehören die III-V Verbindungen zu den direkten Halbleitern, d.h. am Γ-Punkt (k=0) nehmen die Bandenergien $E_\nu(k)$ Extremwerte an. Im Hochanregungsexperiment werden durch die Photonen des Laserfeldes Interbandübergänge angeregt, d.h. Elektronen aus den Valenzbändern ins Leitungsband gehoben, wobei sich unter dem Einfluß des durch die Probe geschickten Lichtfeldes ein stationärer Nichtgleichgewichtszustand einstellt. In den Experimenten werden

dabei üblicherweise Dichten von $10^{16}...10^{18}cm^{-3}$ erreicht. Die genannten Dichten bedingen im Kristall - je nach Bandmasse - Quasifermienergien von bis zu 50 meV. Im Vergleich zur absoluten Bandbreite von zumeist mehreren Elektronenvolt sind diese Beträge so gering, daß es möglich ist, eine "effektive Massennäherung" [10] vorzunehmen, d.h. die Dispersionsrelationen der Elektronen $E_\nu(k)$ durch ihre Entwicklung in der Nähe des Γ-Punktes zu ersetzen (siehe Abbildung 5 und Abbildung 6).

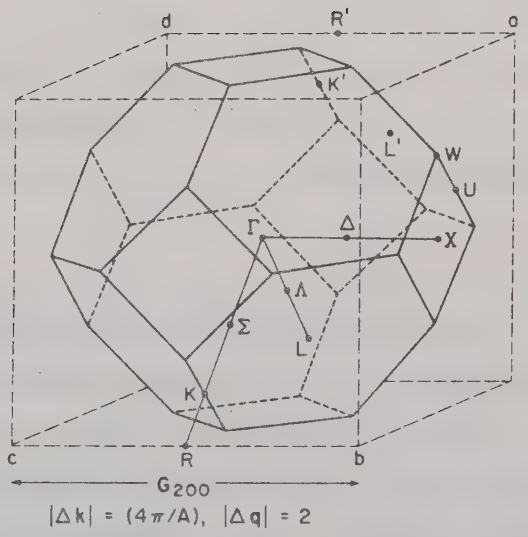


Abbildung 5. Symmetriepunkte: Die erste Brilloinzone für einen Zinkblendekristall mit verschiedenen Symmetriepunkten (aus [44]).

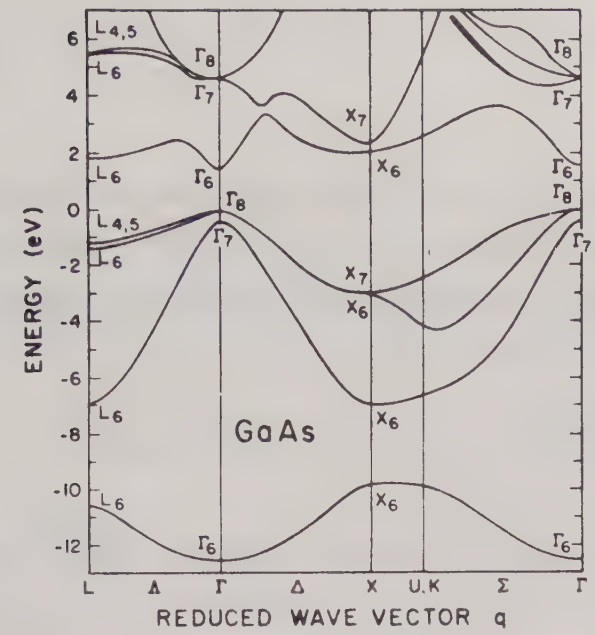


Abbildung 6. Bandstruktur für GaAs: Elektronenenergie gegen Wellenzahlvektor aus einer nichtlokalen EPM-Rechnung von Chelikowsky und Cohen [45].

Die Form der Energiebänder wird dabei im wesentlichen durch das Kristallfeld und die Spin-Bahn-Kopplung beeinflußt. In III-V Halbleitern liegt folgende Situation vor.

Die s- und p-Orbitale spalten also nicht im Kristallfeld auf. Es bleibt dann der Gesamtdrehimpuls J eine gute Quantenzahl, und man kann in der Nähe des Γ-Punktes das Kristallfeldpotential $V(\vec{r})=V(|\vec{r}|)$ durch ein isotropes ersetzen. Derartige, sphärische Modelle werden in der Literatur (siehe zB. [46]) ausführlich diskutiert.

3.1 $\vec{K}\cdot\vec{P}$ STÖRUNGSRECHNUNG

In einem sphärischen Modell setzt sich der Hamiltonoperator aus einem kinetischen Anteil, dem sphärischen Potential $V=V(|\vec{r}|)$ und der Spin-Bahn Kopplung H_{so} zusammen. Die Schrödingergleichung für die Bewegung eines Elektrons im Kristall lautet dann

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V(|\vec{r}|) + H_{so}\right)\psi_{\lambda k}(\vec{r}) = E_{\lambda k}\,\psi_{\lambda k}(\vec{r}) \qquad (3.1)$$

Unter Zuhilfenahme des Blochschen Theorems und bei Vernachlässigung der Umklapprozesse gelangen wir zu einer Schrödingergleichung für die atomaren Wellenfunktionen $u_\lambda(\vec{r})$ [43],[47]. Aus

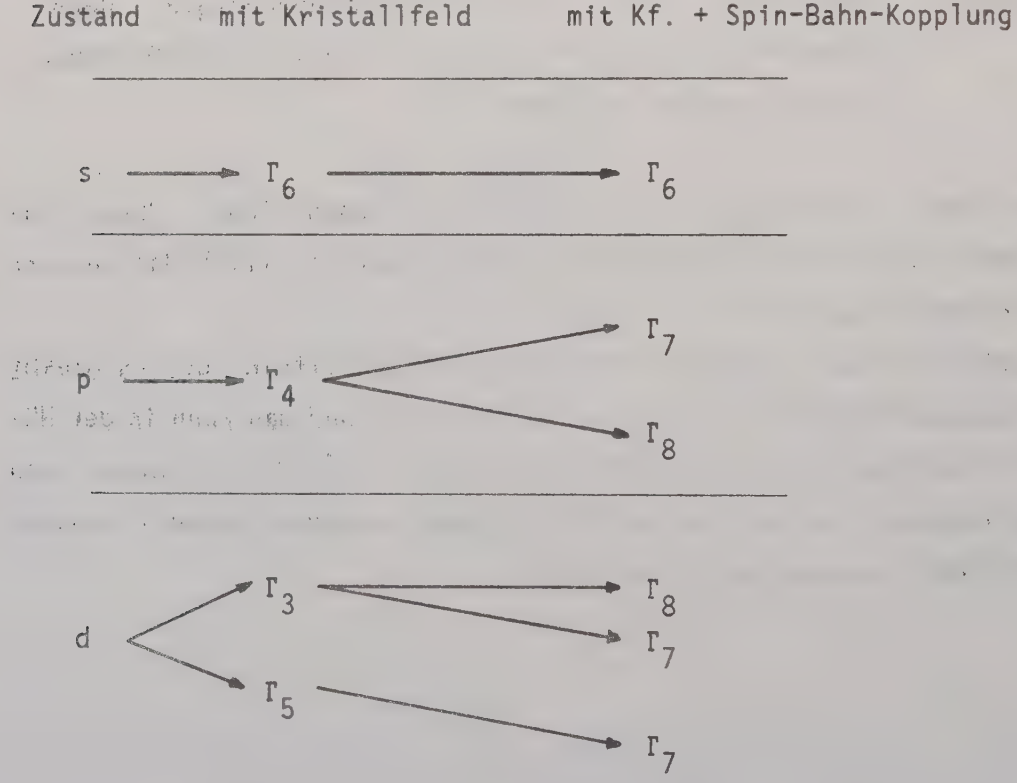


Abbildung 7.

$$\psi_{\lambda k}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}\, u_{\lambda k}(\vec{r}) \approx e^{i\vec{k}\vec{r}}\, u_{\lambda}(\vec{r}) \tag{3.2}$$

und

$$\frac{p^2}{2m}\, \psi_{\lambda k}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}\, \frac{(\vec{p}+\hbar\vec{k})^2}{2m}\, u_{\lambda k}(\vec{r}) \tag{3.3}$$

folgt

$$\left(H_0 + \frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}}{m}\right) u_{\lambda}(\vec{r}) = E_{\lambda}\, u_{\lambda}(\vec{r}) \tag{3.4}$$

mit

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(|\vec{r}|) + H_{SO} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{3.5}$$

In der Nähe des Γ-Punktes ($\vec{k}=\vec{0}$) wird die Wellenzahl $\vec{k}$ zum Kleinheitsparameter. Die Gleichung (3.4) wird dementsprechend störungstheoretisch behandelt, wobei die Auswertung bis zur Ordnung $O(k^2)$ exakt sein muß. (Es sollen ja alle Effekte erfasst werden, die zu den Bandmassen beitragen). Das wird einer Arbeit von Luttinger [48] folgend mit einer kanonischen Transformation erreicht.

Das ungestörte Problem erweist sich als ein um $\hbar^2k^2/2m_0$ verschobenes Feinstrukturproblem. Der Gesamtdrehimpuls $J=l+s$ ist also eine gute Quantenzahl und für die Spin-Bahn-Kopplung ergibt sich:

$$H_{SO} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\left(\vec{\nabla}V \times \vec{p}\right)\cdot\vec{\sigma}$$

$$= \frac{2\Delta}{3}\, \vec{l}\cdot\vec{\sigma} \tag{3.6}$$

Die an dieser Stelle ziemlich willkürlich erscheinende Grösse

$$\Delta = \frac{3\hbar^2}{8m^2c^2} \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{dV}{dr} \tag{3.7}$$

erweist sich später als die Spin-Bahn Aufspaltung. Für einen sphärischen Oszillator, den man bei der chemischen Bindung im allgemeinen zugrundelegt, wird die Spin-Bahn Aufspaltung Δ ortsunabhängig. Da

$$J^2 = \ell^2 + \sigma^2 + 2\vec{\ell}\cdot\vec{\sigma}$$

ist, gilt somit

$$H_{so} = \frac{\Delta}{3}\left[J^2 - \ell^2 - \sigma^2\right] \tag{3.8}$$

Im weiteren ist es das Ziel, die Krümmung der an der Bindung beteiligten Bänder (s-und p-Bänder) zu berechnen.

l	J	Energie	Entartung
s	1/2	$E_s^0+h^2k^2/2m_0$	2-fach
p	3/2	$E_p^0+\Delta/3+h^2k^2/2m_0$	4-fach
	1/2	$E_p^0-2\Delta/3+h^2k^2/2m_0$	2-fach

Abbildung 8.

Die $\vec{k}\vec{p}$-Störung kann die Entartung am Γ-Punkt nicht mehr weiter verringern, da sie ja dort verschwindet. Sie führt aber sehr wohl zu einer Änderung der Bandmassen.

Zunächst müssen jedoch noch die Matrixelemente der Störung berechnet werden. Das geschieht mit Hilfe der Gradientenformel [49], einer der wichtigsten Anwendungen des Wigner-Eckart-Theorems. Sei

$$\nabla_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\nabla_x + i \nabla_y \right)$$

$$\nabla_0 = \nabla_z$$

$$\nabla_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\nabla_x - i \nabla_y \right) \tag{3.9}$$

und $|m\sigma\rangle_l$ die Lösung des atomaren Problems (ohne Einbeziehung der Spin-Bahn-Kopplung)

$$H_0^a = \frac{p^2}{2m} + V(|\vec{r}|)$$

mit dem Bahndrehimpuls l, der Magnetquantenzahl m und dem Spin σ. Die radialen Anteile werden in dieser Notation unterdrückt, da man Ansätze für das Potential $V(|\vec{r}|)$ machen müßte, wollte man Aussagen über die Matrixelemente gewinnen. Die Philosophie dieser Rechnung sieht aber genau umgekehrt aus. Es besteht der Wunsch, die unbekannten Grössen auf experimentell gut zugängliche Materialparameter zurückzuführen. Entsprechend werden auch die Grössen E_s^0, E_p^0, Δ und

$$P\,\delta(\sigma,\sigma') = \frac{\hbar}{m}\,{}_1\langle 0\sigma|p_z|0\sigma'\rangle_0$$

$$= \frac{\hbar^2}{mi}\,{}_1\langle 0\sigma|\nabla_0|0\sigma'\rangle_0 \qquad (3.10)$$

aus dem Experiment genommen. Die Gradientenformel liefert dann

$$\frac{\hbar^2}{mi}\,{}_1\langle \mu\sigma|\nabla_\mu|0\sigma'\rangle_0 = (-1)^\mu \frac{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -\mu & \mu & 0 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}\, P\,\delta(\sigma,\sigma') \qquad (3.11)$$

Das Einsetzen der Wignerschen 3j-Symbole $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ liefert weiter

$$\frac{\hbar^2}{mi}\,{}_1\langle \mu\sigma|\nabla_\mu|0\sigma'\rangle_0 = (-1)^\mu \frac{\sqrt{2}\,(-1)^{1+\mu}}{\sqrt{2}\,(-1)^1}\, P\,\delta(\sigma,\sigma')$$

$$= (-1)^{2\mu}\, P\,\delta(\sigma,\sigma')$$

$$= P\,\delta(\sigma,\sigma') \qquad (3.12)$$

Das Ergebnis ist unabhängig von μ! Den Zusammenhang mit den Wellenfunktionen $|jm_j\rangle_1$ bringen die Clebsch-Gordon-Koeffizienten. Es ergibt sich

$$|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\rangle_1 = |1\uparrow\rangle_1$$

$$|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_1 = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|0\uparrow\rangle_1 + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|1\downarrow\rangle_1$$

$$|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_1 = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|-1\uparrow\rangle_1 + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|0\downarrow\rangle_1$$

$$|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\rangle_1 = |-1\downarrow\rangle$$

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_1 = -\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|0\uparrow\rangle_1 + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|1\downarrow\rangle_1$$

$$|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_1 = -\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|-1\uparrow\rangle_1 + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|0\downarrow\rangle_1 \qquad (3.13)$$

für die p-Zustände und

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_0 = |0\uparrow\rangle_0$$

$$|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_0 = |0\downarrow\rangle_0 \qquad (3.14)$$

für die s-Zustände.

Die $\vec{k}\vec{p}$-Methode besteht nun darin, eine ganze Reihe weiterer Bänder (bis zu 15) mitzuberücksichtigen und dann die Matrix exakt zu diagonalisieren (siehe zB. [50]). Die Ergebnisse gleichen denen anderer Bandstrukturrechnungen. Beschränkt man sich auf die an der chemischen Bindung betei-

ligten p- und s-Bänder, so erhält man die Ergebnisse von Kane [51],[52]. Die Bandmasse des HH-Bandes (heavy-hole) wird hierbei positiv, ein Artefakt der Näherung. Im Unterschied zu der $\vec{k}\vec{p}$-Methode, die gute Lösungen innerhalb der gesamten Brillouinzone liefert, reicht in der Nähe des Γ-Punktes eine störungstheoretische Behandlung, zB. über kanonische Transformationen [48].

$$\bar{H} = e^{-S} H e^{S}$$

$$S^{+} = -S \tag{3.15}$$

Mit $H=H_0+H'$ findet man

$$\bar{H} = H + [H,S] + \frac{1}{2}[[H,S],S] + \dots$$

$$= H_0 + H' + [H_0,S] + [H',S] + \frac{1}{2}[[H_0,S],S] + \dots$$

Mit der Forderung

$$[H_0,S] = -H'$$

und damit

$$S_{mn} = \begin{cases} 0 & \text{für } m = n \\ \dfrac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} & \text{für } m \neq n \end{cases} \tag{3.17}$$

erreicht man zwar keine Diagonalisierung des Hamiltonoperators. Man erzwingt aber eine Diagonalisierung bis zur quadratischen Ordnung innerhalb des Potentials, d.h. zur Ordnung $O(k^2)$.

$$\bar{H} = H_0 + \frac{1}{2}\left[H', S\right] + O(k^3) \tag{3.18}$$

Die Energien lauten

$$E_n = \langle n | \bar{H} | n \rangle = E_n^0 + \sum_{\rho} \frac{H'_{n\rho} H'_{\rho n}}{E_n^0 - E_\rho^0} \tag{3.19}$$

und die Eigenfunktionen

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \sum_{\rho} \frac{H'_{n\rho}}{E_n^0 - E_\rho^0} |\rho^0\rangle \tag{3.20}$$

Wir verschieben nun noch den Energienullpunkt auf die Oberkante des obersten Valenzbandes

$$E_p^0 + \frac{\Delta}{3} \longrightarrow 0$$

$$E_p^0 - \frac{2\Delta}{3} \longrightarrow -\Delta$$

$$E_s^0 \longrightarrow E_g$$

und erhalten dann mit (3.19)

$$E_S = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{k^2 P^2}{3}\left[\frac{1}{E_g+\Delta} + \frac{2}{E_g}\right]$$

$$E_{HH} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} A$$

$$E_{LH} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2k^2 P^2}{3E_g} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} B$$

$$E_{SO} = -\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{3}\frac{k^2 P^2}{E_g+\Delta} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C \qquad (3.21)$$

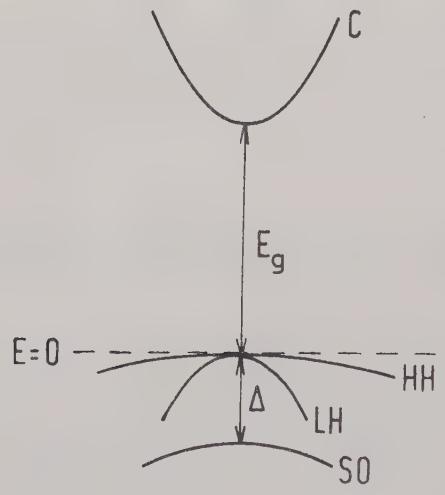


Abbildung 9.

Für A=B=C=0 erhalten wir die Ergebnisse der Kaneschen Arbeit für kleine k zurück Die Koeffizienten A,B,C beschreiben die Kopplung an die anderen

Bänder, hauptsächlich an das nächsthöhere d-Band. Für die Wellenfunktionen erhalten wir

$$|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle_0 = |\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle_0^0 + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,\frac{kP}{E_g}\,|\tfrac{3}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle_1^0 \mp \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,\frac{kP}{E_g+\Delta}\,|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle_1^0$$

$$|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle_1 = |\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle_1^0 \pm \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,\frac{kP}{E_g+\Delta}\,|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle_0^0$$

$$|\tfrac{3}{2},\pm\tfrac{3}{2}\rangle_1 = |\tfrac{3}{2},\pm\tfrac{3}{2}\rangle_1^0$$

$$|\tfrac{3}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle_1 = |\tfrac{3}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle_1^0 - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,\frac{kP}{E_g}\,|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle_0^0 \qquad (3.22)$$

Die Kopplungen an die restlichen Bänder sind hierbei vernachlässigt. Es ist jetzt kein Problem mehr, die verbleibenden Koeffizienten aus den Experimenten zu bestimmen. Mit

$$\Gamma = \frac{2mP^2}{3\hbar^2} \qquad (3.23)$$

ergibt sich

$$\frac{1}{m_c} = 1 + \Gamma \left[\frac{1}{E_g+\Delta} + \frac{2}{E_g} \right]$$

$$\frac{1}{m_{HH}} = -1 + A$$

$$\frac{1}{m_{LH}} = -1 + \frac{2\Gamma}{E_g} + B$$

$$\frac{1}{m_{SO}} = -1 + \frac{\Gamma}{E_g+\Delta} + C \qquad (3.24)$$

wobei A,B,C,und Γ die gesuchten Grössen sind. Ergebnisse für GaAs sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst.

Materialparameter	Ergebnisse
E_g = 1.42 eV	Γ = 7.117 eV
Δ = .34 eV	A = 3.632
m_e = $6.65*10^{-2}$ m_0	B = 3.192
m_{HH} = $6.65*10^{-2}$ m_0	C = 3.000
m_{LH} = $8.20*10^{-2}$ m_0	
m_{SO} = .3 m_0	
E_{TO} = 33.8 meV	
E_{LO} = 36.7 meV	
ε_∞ = 10.91	

Abbildung 10. Materialparameter von GaAs

Es zeigt sich, daß zum einen "richtige" Bandmassen geliefert werden können und daß zum anderen alle p-Bänder in gleichem Maße an die nächsthöheren

d-Bänder ankoppeln, wie man das auch aus gruppentheoretischen Überlegungen verlangen würde [43],[72].

3.2 DIE "EINFACHEN" MATRIXELEMENTE

Wie bereits im vergangenen Abschnitt gezeigt, bleibt unter dem Einfluß der $\vec{k}\vec{p}$ - Störung in jedem Band λ eine zweifache Entartung. Wir führen diesen internen Freiheitsgrad s in die Notation $|k\lambda s\rangle$ ein, d.h. wir finden im ungestörten Zustand sowohl für das HH-Band als auch für das LH-Band den Gesamtdrehimpuls J=3/2, aber für das HH-Band ist nur s=±3/2 und für das LH-Band nur s=±1/2 zulässig. Im vergangenen Kapitel wurden sämtliche Zustände zum Impuls $\vec{k}$ berechnet. Die Drehung der ungestörten Zustände wird durch die Rotationsmatizen $d^{(j)}_{m'm}(\beta)$ besorgt (siehe Anhang A2). β ist dabei der Winkel $\sphericalangle \vec{k},\vec{k}+\vec{q}$.

$$
\begin{aligned}
{}^0\langle \vec{k}\lambda s | \vec{k}+\vec{q}\lambda' s'\rangle^0 &= \int d^3r \; u_{\vec{k}\lambda s}(\vec{r})^* \, u_{\vec{k}+\vec{q}\lambda' s'}(\vec{r}) \\
&= \delta(j_\lambda, j_{\lambda'}) \; d^{(j_\lambda)}_{s's}(\beta) \; {}^0\langle \lambda s | \lambda' s'\rangle^0 \qquad (3.25)
\end{aligned}
$$

(Dabei wurde der Index k in ${}^0\langle\lambda s|\lambda' s'\rangle^0$ unterdrückt). Bei der Berechnung der Matrixelemente wird jeweils nur die führende Ordnung mitgenommen, da die nachfolgenden nur 1-3% beitragen. Die Energien sind bezüglich s entartet, sodaß über diesen internen Index aufsummiert werden kann.

$$
\sum_{ss'} |\langle \vec{k}\lambda s | \vec{k}+\vec{q}\lambda' s'\rangle|^2 = \sum_{ss'} \delta(j_\lambda, j_{\lambda'}) \, \left| d^{(j_\lambda)}_{s's}(\beta) \langle \lambda s | \lambda' s'\rangle \right|^2 \qquad (3.26)
$$

I) Intrabandmatrixelemente

Hier ist bereits die 0.Ordnung nichtverschwindend, da $j_\lambda = j_{\lambda'} = j$ ist.

a) Leitungsband (j=1/2)

Aus der Formel (A2.4) folgt

$$\sum_{ss'} \left| \langle k c s | \vec{k}+\vec{q}\, c\, s' \rangle \right|^2 = 2 \cos^2 \frac{\beta}{2} + 2 \sin^2 \frac{\beta}{2} = 2 \qquad (3.27)$$

Das gleiche Ergebnis findet man natürlich auch für das SO-Band. Es ist jedoch von rein akademischem Interesse, da das voll besetzte SO-Band keinerlei Beiträge zur Intrabandstreuung liefert.

b) HH-Band (j=3/2, s=±3/2)

Hier muß die Formel (A5.-) angewandt werden

$$\sum_{ss'} \left| \langle \vec{k}\, HH\, s | \vec{k}+\vec{q}\, HH\, s' \rangle \right|^2 = 2 \cos^6 \frac{\beta}{2} + 2 \sin^6 \frac{\beta}{2}$$

$$= \frac{1}{4} (1+\cos\beta)^3 + \frac{1}{4} (1-\cos\beta)^3$$

$$= 2 \left[\frac{1}{4} + \frac{3}{4} \cos^2\beta \right] \qquad (3.28)$$

c) LH-Band (j=3/2, s=±1/2)

$$\sum_{ss'} \left| \langle \vec{k}\, LH\, s | \vec{k}+\vec{q}\, LH\, s' \rangle \right|^2 = A(\beta) + B(\beta)$$

$$A(\beta) = 2\cos^2\frac{\beta}{2}\left[\cos\beta - \sin^2\frac{\beta}{2}\right]^2$$

$$= (1+\cos\beta)\left[\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\cos\beta\right]^2$$

$$B(\beta) = 2\left[\frac{1}{2}\sin\beta\cos\frac{\beta}{2} + \cos\beta\sin\frac{\beta}{2}\right]^2$$

$$\sum_{ss'} \left|\langle \vec{k}\,LH\,s \,|\, \vec{k}+\vec{q}\,LH\,s'\rangle\right|^2 =$$

$$= \cos^3\beta + \frac{3}{2}\cos^2\beta - \cos\beta + \frac{1}{2}\cos^2\beta\sin\beta \qquad (3.29)$$

Die Ergebnisse (3.27) und (3.28) entsprechen denen von Combescot und Nozieres [53] sowie denen von Aldrich und Silver [54]. Für das LH-Band (3.29) kommt es zu einer Diskrepanz gegenüber der Arbeit von Aldrich und Silver. Wegen der kleinen Bandmasse des LH-Bandes macht sich dieses in den Ergebnissen nicht bemerkbar.

II) Interbandmatrixelemente

Die Interbandmatrixelemente verschwinden im allgemeinen in 0.Ordnung, da die ungestörten Zustände zu verschiedenen Bändern orthogonal sind (siehe (3.13), (3.14) und (3.22)). Eine Ausnahme bilden das HH- und das LH-Band.

a) LH-HH Übergänge

$$\sum_{ss'} \left| \langle \vec{k}\, LH\, s \,|\, \vec{k}+\vec{q}\, HH\, s' \rangle \right|^2 =$$

$$= 2 \left[3 \cos^4 \frac{\beta}{2} \sin^2 \frac{\beta}{2} + 3 \cos^2 \frac{\beta}{2} \sin^4 \frac{\beta}{2} \right]$$

$$= \frac{3}{2} \left[1 + \cos\beta \right] \left[1 - \cos\beta \right]$$

$$= 2 \, \frac{3}{4} \sin^2 \beta \qquad (3.30)$$

wie auch in [53] und [54].

b) SO-C Übergänge

Die nullte Ordnung verschwindet in diesem Fall.

$$\sum_{ss'} \left| \langle \vec{k}\, SO\, s \,|\, \vec{k}+\vec{q}\, C\, s' \rangle \right|^2 =$$

$$= \sum_{ss'} \left| (-1)^{s'+\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{kP}{E_g+\Delta} \, {}^{0}\langle \vec{k}\, SO\, s \,|\, \vec{k}+\vec{q}\, SO\, s' \rangle^{0} + \right.$$

$$\left. + (-1)^{s-\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{kP}{E_g+\Delta} \, {}^{0}\langle \vec{k}\, C\, s \,|\, \vec{k}+\vec{q}\, C\, s' \rangle \right|^2$$

$$= \frac{2}{3} \left(\frac{kP}{E_g+\Delta} \right)^2 \left[2 \sin \frac{\beta}{2} \right]^2$$

$$= 2 \, \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\Gamma}{E_g+\Delta} \right)^2 \left(1 - \cos\beta \right)^2 \qquad (3.31)$$

3.3 DIE OPTISCHEN MATRIXELEMENTE

Die ungestörten Zustände werden wiederum durch die Drehmatrizen in die $\vec{k}$-Richtung gedreht, d.h.

$$\langle \vec{k}\ So\ s \,|\, \vec{o} \,|\, \vec{k}+\vec{q}\ c\ s' \rangle = \sum_{\sigma} d^{(\frac{1}{2})}_{s'\sigma}(\beta)\ \langle So\ s \,|\, \vec{o} \,|\, c\sigma \rangle \qquad (3.32$$

mit dem hermitischen Operator

$$\vec{o} = \frac{\hbar^2}{mi}\,\vec{\nabla}$$

Mit (3.13) ergibt sich für die Matrixelemente zwischen SO- und C-Band das folgende Ergebnis.

$$\langle So\ \tfrac{1}{2} \,|\, \vec{o} \,|\, c\ \tfrac{1}{2} \rangle = -\sqrt{\tfrac{1}{3}}\ P\ \vec{e}_z$$

$$\langle So\ -\tfrac{1}{2} \,|\, \vec{o} \,|\, c\ -\tfrac{1}{2} \rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\ P\ \vec{e}_z$$

$$\langle So\ \tfrac{1}{2} \,|\, \vec{o} \,|\, c\ -\tfrac{1}{2} \rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\ P\ \vec{e}_+$$

$$\langle So\ -\tfrac{1}{2} \,|\, \vec{o} \,|\, c\ \tfrac{1}{2} \rangle = -\sqrt{\tfrac{2}{3}}\ P\ \vec{e}_- \qquad (3.34)$$

Für das Matrixelement $|O^{(2)}_{so,c}|^2$, das in den Übergangsraten 2.Ordnung (siehe Abschnitt 2.3) auftritt, ergibt sich dann

$$\left|O^{(2)}_{so,c}\right|^2 = \sum_{ss'} \left| \sum_{\sigma''} \left\{ \langle \vec{k}+\vec{q}_2\, c\, s | \frac{\vec{p}\cdot\vec{e}^{(1)}}{\sqrt{m}} | \vec{k}\, so\, \sigma'' \rangle \langle \vec{k}\, so\, \sigma'' | \frac{\vec{p}\cdot\vec{e}^{(2)}}{\sqrt{m}} | \vec{k}+\vec{q}_1\, c\, s' \rangle - \right.\right.$$

$$\left.\left. - \langle \vec{k}+\vec{q}_2\, c\, s | \frac{\vec{p}\cdot\vec{e}^{(2)}}{\sqrt{m}} | \vec{k}\, so\, \sigma'' \rangle \langle \vec{k}\, so\, \sigma'' | \frac{\vec{p}\cdot\vec{e}^{(1)}}{\sqrt{m}} | \vec{k}+\vec{q}_1\, c\, s' \rangle \right\} \right|^2$$

$$= \frac{m^2}{\hbar^4} \sum_{ss'} \left| \sum_{\sigma\sigma'} d^{(\frac{1}{2})}_{s\sigma}(\beta)\, d^{(\frac{1}{2})}_{s'\sigma'}(\gamma)\, M_{\sigma\sigma'} \right|^2 \qquad (3.35)$$

wobei $\beta = \sphericalangle \vec{k}, \vec{k}+\vec{q}_2$ und $\gamma = \sphericalangle \vec{k}, \vec{k}+\vec{q}_1$ ist. Das entlang der Quantisierungsachse ausgerichtete Matrixelement ist

$$M_{\sigma\sigma'} = \sum_{\sigma''} \left\{ \langle c\sigma | \vec{o} | so\sigma'' \rangle \cdot \vec{e}^{(1)} \langle so\sigma'' | \vec{o} | c\sigma' \rangle \vec{e}^{(2)} - \right.$$
$$\left. - \langle c\sigma | \vec{o} | so\sigma'' \rangle \cdot \vec{e}^{(2)} \langle so\sigma'' | \vec{o} | c\sigma' \rangle \cdot \vec{e}^{(1)} \right\}$$

Die Matrixelemente $M_{\sigma\sigma'}$ berechnen sich dann wie folgt (3.36)

a) Diagonalanteile

$$\langle c\sigma|\vec{o}|s_0\sigma''\rangle\cdot\vec{e}^{(1)}\,\langle s_0\sigma''|\vec{o}|c\sigma\rangle\cdot\vec{e}^{(2)} =$$

$$= \begin{cases} \frac{P^2}{3}\, e_z^{(1)}\, e_z^{(2)} & \text{für } \begin{cases} \sigma = \sigma'' = \frac{1}{2} \\ \sigma = \sigma'' = -\frac{1}{2} \end{cases} \\ \frac{2}{3}\, P^2\, e_+^{(1)}\, e_-^{(2)} & \text{für } \sigma = \frac{1}{2} \quad \sigma'' = -\frac{1}{2} \\ \frac{2}{3}\, P^2\, e_-^{(1)}\, e_+^{(2)} & \text{für } \sigma = -\frac{1}{2} \quad \sigma'' = \frac{1}{2} \end{cases} \qquad (3.37)$$

Für die Diagonalelemente der Matrix M ergibt sich dann mit

$$\alpha = \frac{2P^2}{3}\left\{ e_+^{(1)}\, e_-^{(2)} - e_-^{(1)}\, e_+^{(2)} \right\}$$

$$= -i\,\frac{2P^2}{3}\left\{ e_x^{(1)}\, e_y^{(2)} - e_y^{(1)}\, e_x^{(2)} \right\}$$

$$= -i\,\frac{2P^2}{3}\left[\vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)}\right]_z \qquad (3.38)$$

$$M_{\sigma\sigma} = \begin{cases} \alpha & \text{für } \sigma = \frac{1}{2} \\ -\alpha & \text{für } \sigma = -\frac{1}{2} \end{cases} \qquad (3.39)$$

b) Nichtdiagonalanteile

Hier finden wir zunächst

$$\langle c\,-\sigma|\vec{o}|so\,\sigma''\rangle\cdot\vec{e}^{(1)}\,\langle so\,\sigma''|\vec{o}|c\,\sigma\rangle\cdot\vec{e}^{(2)} =$$

$$= \frac{\sqrt{2}\,P}{3}\begin{cases} -e_-^{(1)}\,e_z^{(2)} & \text{für } \sigma=\frac{1}{2}\begin{cases}\sigma''=\frac{1}{2}\\ \sigma''=-\frac{1}{2}\end{cases} \\ -e_-^{(2)}\,e_z^{(1)} & \\ +e_+^{(2)}\,e_z^{(1)} & \text{für } \sigma=-\frac{1}{2}\begin{cases}\sigma''=\frac{1}{2}\\ \sigma''=-\frac{1}{2}\end{cases} \\ +e_+^{(1)}\,e_z^{(2)} & \end{cases} \qquad (3.40)$$

Man sieht aufgrund der Symmetrie sofort, daß die Nichtdiagonalelemente der Matrix M verschwinden, sodaß

$$M_{\sigma\sigma'} = \alpha\,\delta(\sigma,\sigma')\,\left\{\delta(\sigma,\tfrac{1}{2}) - \delta(\sigma,-\tfrac{1}{2})\right\} \qquad (3.41)$$

Die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit $|O^{(2)}_{so,c}|^2$, vereinfacht sich damit wesentlich. Es gilt jetzt

$$\left|O^{(2)}_{so,c}\right|^2 = \frac{m^2}{\hbar^4}\,|\alpha|^2\sum_{ss'} D_{ss'}^{\;2} \qquad (3.42)$$

wobei

$$\mathcal{D}_{ss'} = \left| d^{(\frac{1}{2})}_{s\frac{1}{2}}(\beta)\, d^{(\frac{1}{2})}_{s'\frac{1}{2}}(\gamma) - d^{(\frac{1}{2})}_{s-\frac{1}{2}}(\beta)\, d^{(\frac{1}{2})}_{s'-\frac{1}{2}}(\gamma) \right|$$

$$= \mathcal{D}_{s's} \qquad (3.43)$$

eine symmetrische Matrix ist, wie man durch Einsetzen der Drehmatrizen leicht feststellt. Für die Diagonalelemente ergibt sich mit (3.5)

$$\mathcal{D}_{ss} = \left| \cos\frac{\beta}{2}\cos\frac{\gamma}{2} - \sin\frac{\beta}{2}\sin\frac{\gamma}{2} \right| = \left| \cos\left(\frac{\beta+\gamma}{2}\right) \right| \qquad (3.44)$$

für s=±1/2. Das Nichtdiagonalelement (s≠s') lautet

$$\mathcal{D}_{ss'} = \left| \sin\frac{\beta}{2}\cos\frac{\gamma}{2} - \cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\gamma}{2} \right| = \left| \sin\left(\frac{\beta+\gamma}{2}\right) \right| \qquad (3.45)$$

sodaß wir schließlich das folgende Ergebnis finden

$$\left| O^{(2)}_{s0,c} \right|^2 = 2\,\frac{m^2}{\hbar^4}\,|\alpha|^2 \left\{ \cos^2\left(\frac{\beta+\gamma}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\beta+\gamma}{2}\right) \right\}$$

$$= \frac{8}{9}\,\frac{m^2}{\hbar^4}\,p^4 \left| \vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)} \right|^2 \cos^2\left(\vec{k}, \vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)}\right)$$

Mit (3.13) ergibt sich endlich

$$\left| O^{(2)}_{s0,c} \right|^2 = 2\,r^2 \left| \vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)} \right|^2 \cos^2\left(\vec{k}, \vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)}\right) \qquad (3.46)$$

Diese Matrixelemente wurden bereits von Hamilton und McWhorter [31] berechnet, die Winkelabhängigkeiten wurden jedoch nicht mitberücksichtigt.

Wie sich in Abschnitt 2 gezeigt hat, führt die Berechnung der Übergangsraten im Festkörper auf die Berechnung des Stromes[12]

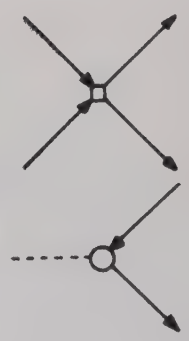
$$J_{\lambda'\lambda}(Q',Q) = \langle \lambda' Q' | \lambda Q \rangle \, c^{+}_{\lambda' Q'} \, c_{\lambda Q} \tag{4.1}$$

In hochreinen Materialien kann die Streuung an Störstellen vernachlässigt werden, sodaß die zeitliche Entwicklung des Stromes nur noch durch die Elektron-Elektron Wechselwirkung H_{e-e} und die Elektron-Phonon Wechselwirkung H_{e-p} beeinflußt wird, d.h.

$$H = H_e + H_p + H_{e-e} + H_{e-p} \tag{4.2}$$

Die Bewegungsgleichung lautet damit

$$\begin{aligned} \dot{J}_{\lambda'\lambda}(Q',Q) = {} & \frac{i}{\hbar} \left\{ E_{\lambda'}(Q') - E_{\lambda}(Q) \right\} J_{\lambda'\lambda}(Q',Q) + \\ & + \frac{i}{\hbar} \left[H_{e-e}, J_{\lambda'\lambda}(Q',Q) \right] + \\ & + \frac{i}{\hbar} \left[H_{e-p}, J_{\lambda'\lambda}(Q',Q) \right] \end{aligned} \tag{4.3}$$



---

[12] Es erweist sich bei der Aufstellung der Bewegungsgleichungen in RPA als nützlich, das Matrixelement $\langle \lambda' q' | \lambda q \rangle$ in den Strom miteinzubeziehen.

4.1 ELEKTRON-ELEKTRON WECHSELWIRKUNG

Die Elektron-Elektron Wechselwirkung wird durch das Coulombpotential vermittelt, d.h.

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \int d^3r\, d^3r'\, \Psi(\vec{r})^+ \Psi(\vec{r}')^+ \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \Psi(\vec{r}')\, \Psi(\vec{r}) \qquad (4.2a)$$

Zunächst wird das Coulombpotential nach ebenen Wellen entwickelt.

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q\; e^{i\vec{q}\vec{r}}\, V_q$$

$$V_q = e^2 \int d^3r\, \frac{e^{-i\vec{q}\vec{r}}}{|\vec{r}|} = \frac{4\pi e^2}{q^2} \qquad (4.4)$$

wobei eine infinitesimale Abschirmung innerhalb der Coulombwechselwirkung angenommen werden muß, um die Konvergenz des Integrals (4.4) zu erzwingen. Desweiteren werden die Feldoperatorn $\Psi^+(\vec{r})$ und $\Psi(\vec{r})$ wieder nach Blochfunktionen entwickelt. Es ergibt sich unter Vernachlässigung der Umklapprozesse

$$H_{e-e} = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{k_1 k_2 q \\ \lambda_1 \ldots \lambda_4}} V_q \langle \lambda_1 k_1+q | \lambda_2 k_1 \rangle \langle \lambda_3 k_2-q | \lambda_4 k_2 \rangle\, c^+_{\lambda_1 k_1+q}\, c^+_{\lambda_3 k_2-q}\, c_{\lambda_4 k_2}\, c_{\lambda_2 k_1}$$

Als Beitrag der Elektron-Elektron Wechselwirkung in der Bewegungsgleichung (4.3) finden wir nach etwas länglichen Rechnungen (4.5)

$$\frac{i}{\hbar}\left[H_{e-e}, \mathcal{F}_{\lambda'\lambda}(Q',Q)\right] = \frac{i}{\hbar}\,\langle\lambda' Q' | \lambda Q\rangle \cdot$$

$$\cdot \Bigg\{ \sum_{\substack{q \\ \mu_1 \mu_2}} V_q \langle \mu_1 Q+q | \mu_2 Q\rangle \langle \lambda Q | \mu_1 Q+q\rangle \, c^{+}_{\lambda' Q'} c_{\mu_2 Q} -$$

$$- \sum_{\substack{q \\ \mu_1 \mu_2}} V_q \langle \mu_1 Q' | \mu_2 Q'-q\rangle \langle \mu_2 Q'-q | \lambda' Q'\rangle \, c^{+}_{\mu_1 Q'} c_{\lambda Q} +$$

$$+ \sum_{\substack{k_1 q \\ \mu_1 \mu_2 \mu_4}} V_q \langle \mu_1 k_1+q | \mu_4 k_1\rangle \langle \mu_2 Q'-q | \lambda' Q'\rangle \, c^{+}_{\mu_1 k_1+q} c_{\mu_4 k_1} \underline{c^{+}_{\mu_2 Q'-q} c_{\lambda Q}} -$$

$$- \sum_{\substack{k_1 q \\ \mu_1 \mu_3 \mu_4}} V_q \langle \mu_1 k_1+q | \mu_4 k_1\rangle \langle \lambda Q | \mu_3 Q+q\rangle \, \underline{c^{+}_{\lambda' Q'} c_{\mu_3 Q+q}} \, c^{+}_{\mu_1 k_1+q} c_{\mu_4 k_1} \Bigg\} \qquad (4.6)$$

Die ersten beiden Terme der Gleichung (4.6) liefern eine Verschiebung der Bänder. Da die Bandenergien aber aus dem Experiment genommen werden (siehe Abschnitt 3), müssen diese Terme außer Acht gelassen werden. Die beiden letzten Terme liefern die Elektron-Elektron Wechselwirkung. In RPA werden die unterstrichenen Teile durch ihre Erwartungswerte ersetzt [66][13] . Es ergibt sich

---

[13] Man bezeichnet diese Näherung deshalb auch als Dominant-Term-Approximation.

$$\frac{i}{\hbar}\left[H_{e-e_i}\, \mathcal{F}_{\lambda'\lambda}(Q',Q)\right] =$$

$$= \frac{i}{\hbar} V_{Q'-Q} \left|\langle \lambda' Q' | \lambda Q \rangle\right|^2 \left\{ f_\lambda(Q) - f_{\lambda'}(Q') \right\} \sum_{\substack{k \\ \mu_1 \mu_2}} \mathcal{F}_{\mu_1\mu_2}(k+Q'-Q, k) \qquad (4.7$$

wobei $$f_\lambda(Q) = \langle c^+_{\lambda Q}\, c_{\lambda Q} \rangle_T \qquad (4.8)$$

die Fermiverteilungsfunktion ist.

4.2 ELEKTRON-PHONON WECHSELWIRKUNG

Bestimmend für die Wechselwirkung zwischen Elektron und Ion ist das anziehende Potential V_{e-ion}. Wegen des grossen Massenunterschiedes ($m_e/m_{ion} \approx 1/10000$) zwischen Elektronen und Ionen kann das Potential V_{e-ion} - das vom j-ten Atom erzeugt wird - bezüglich der Auslenkungen um die Ruhelagen $R^{(0)}_j$, die durch die chemische Bindung bestimmt werden ,entwickelt werden, d.h.

$$V_{e-i}(\vec{r}-\vec{R}_j) = V_{e-i}(\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)}) + \vec{x}_j \cdot \vec{\nabla} V\Big|_{\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)}} + \ldots$$

mit

$$\vec{x}_j = \vec{R}_j - \vec{R}_j^{(0)} \tag{4.9}$$

Der erste Term beschreibt die Wechselwirkung des Elektrons mit dem Ion in der Ruhelage. Das Potential

$$V_g(\vec{r}) = \sum_j V_{e-i}(\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)})$$

ist demnach das gitterperiodische Potential. Der zweite Term beschreibt die Änderungen, die durch die Bewgung der Ionen verursacht werden, d.h.

$$H_{e-p} = \int d^3r\, \rho(\vec{r}) \sum_j \vec{x}_j \cdot \vec{\nabla} V\Big|_{\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)}} \tag{4.10}$$

Die Auslenkungen x_j werden nach Boseoperatoren entwickelt

$$\vec{x}_j = i \sum_{q\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_\lambda(q)}}\, \vec{e}_\lambda(q) \left\{ a^+_{-q\lambda} + a_{q\lambda} \right\} e^{i\vec{q}\vec{R}_j^{(0)}} \tag{4.11}$$

wobei $\omega_\lambda(q)$ die Eigenfrequenz des Phononenastes λ ist, $e_\lambda(q)$ die Polarisation und ρV die Gesamtmasse aller Ionen. Das Potential V_{e-ion} wird auch nach ebenen Wellen entwickelt, sodaß wir unter Vernachlässigung der Umklapprozesse folgendes Ergebnis finden

$$H_{e-p} = \sum_{\substack{kq \\ \mu_1\mu_2}} M_q \, \mathcal{F}_{\mu_1\mu_2}(k+q, k) \left\{ a^+_{-q} + a_q \right\}$$

$$M_q = -\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{ph}(q)}} \; \vec{q} \cdot \vec{e}(q) \; V_{e-i}(q)$$

(Der Index, der den Phononenast kennzeichnet ist in dieser Notation unterdrückt).Als Beitrag zur Bewegungsgleichung (4.3) finden wir

$$\frac{i}{\hbar}\left[H_{e-p}, \mathcal{F}_{\lambda'\lambda}(Q', Q)\right] = \frac{i}{\hbar} \langle \lambda' Q' | \lambda Q \rangle \cdot$$

$$\cdot \left\{ \sum_{\mu q} M_q \left\{ a^+_{-q} + a_q \right\} c^+_{\mu Q'+q} c_{\lambda Q} \langle \mu Q'+q | \lambda' Q' \rangle - \right.$$

$$\left. - \sum_{\mu q} M_q \left\{ a^+_{-q} + a_q \right\} c^+_{\lambda' Q'} c_{\mu Q-q} \langle \lambda Q | \mu Q-q \rangle \right\} \qquad (4.14)$$

In RPA werden nur die dominanten Anteile mitgenommen, d.h.

$$\frac{i}{\hbar}\left[H_{e-p}, \mathcal{F}_{\lambda'\lambda}(Q', Q)\right] =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \left| \langle \lambda' Q' | \lambda Q \rangle \right|^2 \left\{ f_\lambda(Q) - f_{\lambda'}(Q') \right\} M_{Q-Q'} \left\{ a^+_{-(Q-Q')} + a_{Q-Q'} \right\} \qquad (4.15$$

I) Polare Kopplung [67]

Die Kopplung zwischen LO-Phononen und Elektronen wird als polare Kopplung bezeichnet. Für longitudinale Moden zeigt die Polarisation in Richtung der Wellenzahl, für LO-Phononen sind die Eigenmoden nur schwach impulsabhängig, sodaß das Matrixelement

$$M_q \propto V_{e-i}(q)\, q \propto \frac{1}{q}$$

ist. Fasst man das gesamte Problem als die Bewegung eines harmonischen Oszillators in einem elektrischen Feld auf, so ist die Energieverschiebung

$$\Delta E = \frac{M_q^2}{\hbar\omega_{LO}} = \frac{V_q}{2}\left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right] \qquad (4.16)$$

genau die Differenz für die potentielle Energie eines Elektrons mit Phononen - Abschirmung durch die hochfrequente DK - und ohne Phononen - Abschirmung durch die statische DK. Für das Matrixelement ergibt sich

$$M_q^2 = \frac{V_q}{\epsilon_\infty} \hbar\omega_{LO} \left[1 - \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0} \right] \qquad (4.17)$$

II) Deformationspotential [68]

Die Kopplung an die longitudinalen akustischen Phononen wird durch das Deformationspotential bewirkt. Wegen $\omega_{ph}(q) \propto |q|$ sind die Hauptbeiträge bei q=0 zu erwarten. Die Elektron-Ion Wechselwirkung durch die Deformationskonstante

$$D = V_{e-i}(q \to 0) \qquad (4.18)$$

ersetzt.

5. STREUUNG DURCH DIE ρA^2-KOPPLUNG

In diesem Abschnitt werden die Einflüsse der Streuung durch die ρA^2-Kopplung berechnet. Dabei wird zunächst die retardierte Greensche Funktion unter Berücksichtigung der Elektron-Elektron und der Elektron-Phonon Wechselwirkung berechnet. Wir gewinnen die Ergebnisse von Pinczuk et al. [36] zurück. In Kapitel 5.1 wird der Einfluß der Intrabandstreuung behandelt. Für die Eigenmoden gewinnen wir dabei die Ergenisse von Kardontchik und Cohen [33] zurück. Darüberhinaus werden die Auswirkungen der Landau-Dämpfung in Abhängigkeit von der Dichte untersucht. Es werden numerische Ergebnisse angegeben. In Kapitel 5.2 werden dann die dämpfenden Einflüsse der Intervalenzband - Streuprozesse behandelt. Für $\vec{q}=0$ werden analytische und $\vec{q}\neq 0$ numerische Ergebnisse angegeben.

In Abschnitt 2 hatte es sich gezeigt, daß die Übergangsrate im wesentlichen durch den Imaginärteil der retardierten Greenschen Funktion (siehe (2.24)) gegeben ist.

$$
\begin{aligned}
\mathcal{G}(\Delta q, \Delta\omega) &= \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ \lambda_1 \dots \lambda_4}} \langle\langle \mathcal{J}_{\lambda_1\lambda_2}(k_1, k_1+\Delta q|t) \,|\, \mathcal{J}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q|0)\rangle\rangle_{\Delta\omega+i\gamma} \\
&= -\frac{i}{\hbar} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ \lambda_1 \dots \lambda_4}} \int_0^\infty dt\, e^{i(\Delta\omega+i\gamma)t} \langle [\mathcal{J}_{\lambda_1\lambda_2}(k_1, k_1+\Delta q|t), \mathcal{J}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q|0)]\rangle \\
&= \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ \lambda_1 \dots \lambda_4}} \int_0^\infty dt\, e^{i(\Delta\omega+i\gamma)t}\, G_{\lambda_1 \dots \lambda_4}(k_1, k_1+\Delta q, k_2, k_2-\Delta q|t)
\end{aligned}
\tag{5.1}
$$

Das Ziel dieses Abschnittes ist nun, die Greensche Funktion $G(\Delta q, \Delta\omega)$ unter Berücksichtigung von Elektron-Elektron und Elektron-Phonon Wechselwirkung aufzustellen und für hochangeregte direkte Halbleiter auszuwerten.

Dazu stellen wir zunächst die Bewegungsgleichung für die retardierte Greensche Funktion auf (siehe auch [30])

$$
\begin{aligned}
G_{\lambda_1 \ldots \lambda_4}(k_1, k_1+\Delta q, k_2, k_2-\Delta q \mid t) &= \\
&= -\frac{i}{\hbar}\, \delta(t) \left\langle \left[J_{\lambda_1\lambda_2}(k_1, k_1+\Delta q), J_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q) \right] \right\rangle + \\
&+ \frac{i}{\hbar} \left\{ E_{\lambda_1}(k_1) - E_{\lambda_2}(k_1+\Delta q) \right\} G_{\lambda_1 \ldots \lambda_4}(k_1, k_1+\Delta q, k_2, k_2-\Delta q \mid t) + \\
&+ \frac{i}{\hbar} \left| \langle \lambda_1 k_1 | \lambda_2\, k_1+\Delta q \rangle \right|^2 \left\{ f_{\lambda_2}(k_1+\Delta q) - f_{\lambda_1}(k_1) \right\} \cdot \\
&\cdot \Bigg\{ V_{\Delta q} \sum_{\substack{Q \\ \mu_1\mu_2}} G_{\mu_1\mu_2\lambda_3\lambda_4}(Q, Q+\Delta q, k_2, k_2-\Delta q \mid t) + \\
&+ M_{\Delta q} \left[F_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q \mid t) + F^{(+)}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q \mid t) \right] \Bigg\}
\end{aligned}
\tag{5.2}
$$

Die Zeitabhängigkeiten lassen sich durch eine Fouriertransformation aus der Gleichung (5.2) eliminieren.[14] Zunächst müssen also die Fouriertransformierten

$$F_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q|t) = -\frac{i}{\hbar}\,\Theta(t) \left\langle \left[b_{\Delta q}(t), \mathcal{F}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q|0)\right]\right\rangle$$

und

$$F^{(+)}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q|t) = -\frac{i}{\hbar}\,\Theta(t) \left\langle \left[b^{+}_{-\Delta q}(t), \mathcal{F}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q|0)\right]\right\rangle$$

bestimmt werden. Die Bewegungsgleichungen der 3-Bein Greenschen Funktionen (5.3) enthalten keine Inhomogenitäten, d.h.

$$\dot{F}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q|t) = -\frac{i}{\hbar}\,\hbar\omega_{ph}\, F_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q|t) - \\ -\frac{i}{\hbar}\, M_{\Delta q} \sum_{\substack{Q \\ \mu_1\mu_2}} G_{\mu_1\mu_2\lambda_3\lambda_4}(Q, Q+\Delta q, k_2, k_2-\Delta q|t)$$

und

$$\dot{F}^{(+)}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q|t) = \frac{i}{\hbar}\,\hbar\omega_{ph}\, F^{(+)}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q|t) + \\ +\frac{i}{\hbar}\, M_{\Delta q} \sum_{\substack{Q \\ \mu_1\mu_2}} G_{\mu_1\mu_2\lambda_3\lambda_4}(Q, Q+\Delta q, k_2, k_2-\Delta q|t)$$

Wir erkennen, daß

(5.4)

---

[14] Ein analoges Verfahren wurde von Puff und Whitfield [57] zur Elimination der Phononenvariable aus der Greenschen Funktion für die Elektronen verwendet.

$$\mathcal{D}^{0}_{ph}(\Delta q, \Delta\omega) = \frac{1}{(\hbar\omega + i\tilde{\gamma}) - \hbar\omega_{ph}} - \frac{1}{(\hbar\omega + i\tilde{\gamma}) + \hbar\omega_{ph}}$$

$$= \frac{2\hbar\omega_{ph}}{(\hbar\omega + i\tilde{\gamma})^2 - \hbar\omega_{ph}^2} \qquad (5.5)$$

gerade die retardierte Greensche Funktion des longitudinalen Phonons ist ist. Bei polarer Kopplung ergibt sich dann (4.17)

$$V_{\Delta q} + M^2_{\Delta q}\, \mathcal{D}^{0}_{ph}(\Delta\omega) = V_{\Delta q}\, \epsilon_{ph}(\Delta\omega)^{-1} \qquad (5.6)$$

mit

$$\epsilon_{ph}(\Delta\omega) = \epsilon_{\infty} \frac{\Delta\omega^2 - \omega_{LO}^2}{\Delta\omega^2 - \omega_{TO}^2} \qquad (5.7)$$

Wir setzen das Ergebnis in die Fouriertransformierte der Gleichung (5.2) ein und finden

$$G_{\lambda_1 \ldots \lambda_4}(k_1, k_1+\Delta q, k_2, k_2-\Delta q \,|\, \Delta\omega) =$$

$$= - \frac{\langle [\mathcal{J}_{\lambda_1\lambda_2}(k_1, k_1+\Delta q), \mathcal{J}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q)] \rangle}{E_{\lambda_2}(k_1+\Delta q) - E_{\lambda_1}(k_1) - \hbar\Delta\omega - i\gamma} +$$

$$+ V_{\Delta q}\, \epsilon_{ph}(\Delta\omega)^{-1}\, \chi^{0}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1+\Delta q, k_1 \,|\, \Delta\omega) \cdot$$

$$\cdot \sum_{\substack{Q \\ \mu_1\mu_2}} G_{\mu_1\mu_2\lambda_3\lambda_4}(Q, Q+\Delta q, k_2, k_2-\Delta q \,|\, \Delta\omega) \qquad (5.8)$$

mit

$$\chi^{0}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1+\Delta q, k_1 | \Delta\omega) = \left|\langle \lambda_1 k_1 | \lambda_2 k_1+\Delta q\rangle\right|^2 \frac{f_{\lambda_2}(k_1+\Delta q) - f_{\lambda_1}(k_1)}{E_{\lambda_2}(k_1+\Delta q) - E_{\lambda_1}(k_1) - \hbar\Delta\omega - i\gamma}$$

und

$$\chi^{0}(\Delta q, \Delta\omega) = \sum_{\substack{k_1 \\ \lambda_1\lambda_2}} \chi^{0}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1+\Delta q, k_1 | \Delta\omega) \qquad (5.9)$$

Diese Integralgleichung enthält nur einen trivialen Kern[15] und kann somit exakt gelöst werden. Wir gehen dazu in zwei Schritten vor. Zunächst wird über λ_1, λ_2 und k_1 summiert. Anschließend wird die Gleichung nach der teilweise aufsummierten Greenschen Funktion aufgelöst. Im zweiten Schritt summieren wir dann über λ_3, λ_4 und k_2. Für die Inhomogenität finden wir hierbei

$$- \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ \lambda_1 \ldots \lambda_4}} \frac{\langle [\mathcal{J}_{\lambda_1\lambda_2}(k_1, k_1+\Delta q), \mathcal{J}_{\lambda_3\lambda_4}(k_2, k_2-\Delta q)] \rangle}{E_{\lambda_2}(k_1+\Delta q) - E_{\lambda_1}(k_1) - \hbar\Delta\omega - i\gamma} =$$

$$= - \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ \lambda_1 \ldots \lambda_4}} \frac{\langle \lambda_1 k_1 | \lambda_2 k_1+\Delta q\rangle \quad \delta(k_2, k_1+\Delta q)}{E_{\lambda_2}(k_1+\Delta q) - E_{\lambda_1}(k_1) - \hbar\Delta\omega - i\gamma} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \delta(\lambda_2, \lambda_3) \langle \mathcal{J}_{\lambda_1\lambda_4}(k_1, k_1)\rangle - \delta(\lambda_1, \lambda_4) \langle \mathcal{J}_{\lambda_2\lambda_3}(k_1+\Delta q, k_1+\Delta q)\rangle \right\}$$

$$= \chi^{0}(\Delta q, \Delta\omega) \qquad (5.10)$$

Damit ergibt sich

---

[15] Der Kern der Integralgleichung ist proportional zum $\hat{1}$ - Operator.

$$\mathcal{G}(\Delta q, \Delta\omega) = \frac{\chi^{0}(\Delta q, \Delta\omega)}{1 - V_{\Delta q}\, \epsilon_{ph}(\Delta\omega)^{-1}\, \chi^{0}(\Delta q, \Delta\omega)} \tag{5.11}$$

Bei Vernachlässigung der Elektron-Phonon Wechselwirkung ($\varepsilon_{ph}(\omega)=\varepsilon_{\infty}$) ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}\, \mathcal{G}(\Delta q, \Delta\omega) &= \mathrm{Im} \left\{ \frac{\chi^{0}}{1 - V_{\Delta q}\, \chi^{0}} \right\} \\ &= \mathrm{Im} \left\{ \frac{\chi^{0}(1 - V_{\Delta q}\, \chi^{0*})}{|1 - V_{\Delta q}\, \chi^{0}|^{2}} \right\} \\ &= \frac{1}{V_{\Delta q}}\, \mathrm{Im} \left\{ \frac{1}{\epsilon_{EC}(\Delta q, \Delta\omega)} \right\} \end{aligned} \tag{5.12}$$

wobei

$$\epsilon_{EC}(\Delta q, \Delta\omega) = 1 - V_{\Delta q}\, \chi^{0}(\Delta q, \Delta\omega) \tag{5.13}$$

die dielektrische Funktion für das Elektronengas in RPA ist. Sie wurde im Einbandfall zuerst von Lindhard [58] und im Mehrbandfall zuerst von Ehrenreich und Cohen [66] aufgestellt. Mit (2.24) finden wir ein weiteres wichtiges Resultat

$$\dot{W}_{1\to 2} \propto \frac{1}{V_{\Delta q}} \left[\frac{|\vec{e}^{(1)} \cdot \vec{e}^{(2)}|^{2}}{e^{-\beta\Delta\omega} - 1} \right] \mathrm{Im} \left[\frac{1}{\epsilon_{EC}(\Delta q, \Delta\omega)} \right] \tag{5.14}$$

das von Zubarev [59] gefunden wurde.

Die Mitberücksichtigung der Elektron-Phonon Kopplung führt zu einer dynamischen Abschirmung des Coulombpotentials (siehe (5.11)). Für die Übergangsrate finden wir das Resultat von Pinczuk et al. [36]

das Einführen einer Relaxationszeitnäherung (siehe Anhang A3) führt lediglich zu einer Modifikation der Suszeptibilität $\chi^0(\Delta q,\Delta\omega)$.
Wie man aus Formel (5.9) leicht sieht, liefern die vollbesetzten bzw. die völlig leeren Bänder keinerlei Beitrag zum differentiellen Wirkungsquerschnitt. Der Grund hierfür ist im Pauli-Prinzip zu finden.

Bei einem idealen Halbleiter ist im Grundzustand das oberste Valenzband voll und das unterste Leitungsband leer. Im hochangeregten Zustand sind dann gleichviele Elektronen im Leitungsband wie Löcher in den Valenzbändern.

$$n = n_e = n_h \tag{5.16}$$

Dabei wird eine homogene Situation zugrundegelegt, d.h. Elektronen und Löcher sind jeweils im totalen Gleichgewicht.

$$n_\lambda = \sum_k \left[\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\lambda k} - \mu_\lambda)} + 1} \right] \tag{5.17}$$

Zur Berechnung der chemischen Potentiale müssen die Fermiintegrale $F_j(x)$ invertiert werden . In Abbildung 11 sind die Ergebnisse für GaAs dargestellt. Man erkennt, daß für die Löcher das chemische Potential schon für kleine Temperaturen negative Werte annimmt (Hochtemperaturlimes), während das chemische Potential der Elektronen noch bei hohen Temperaturen fast gleich der Fermienergie ist (entarteter Grenzfall). Der Grund für dieses

unterschiedliche Verhalten liegt in den unterschiedlichen Bandmassen der Elektronen und der Löcher des HH-Bandes.

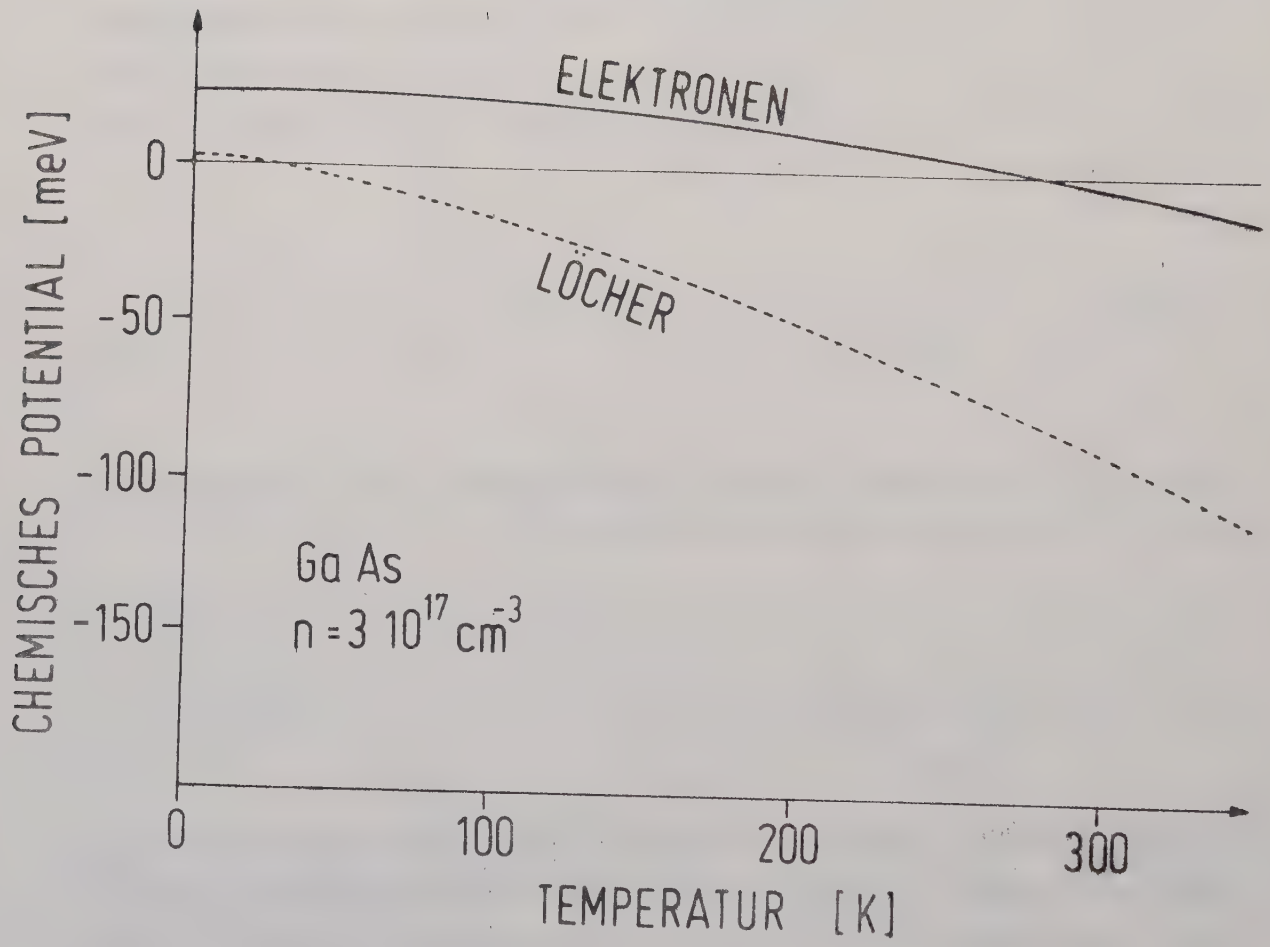


Abbildung 11.

5.1 INTRABANDSTREUUNG

I) Kinematische Uberlegungen

Bevor wir zur Berechnung der Übergangsraten übergehen, wollen wir zunächst einige einfache Überlegungen anstellen. Dazu betrachten wir den entarteten Grenzfall (T=0), d.h. das chemische Potential ist gerade die Fermienergie. Für die Elektronen ergibt sich dann[16]

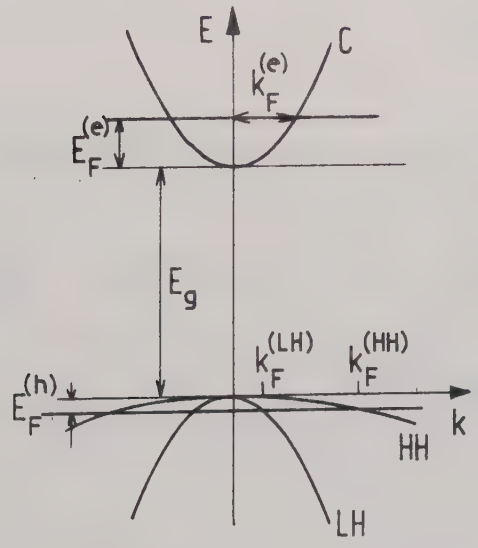


Abbildung 12.

---

[16] Dabei wird die Bandstruktur wie in Abbildung 12 für III-V Halbleiter vorausgesetzt.

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3k \; \Theta\left(E_F^{(e)} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \right)$$

$$= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_c \; E_F^{(e)}}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

d.h.

$$E_F^{(e)} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_c}$$

$$k_F^{(e)} = k_F = \sqrt{3\pi^2 n} \qquad (5.18)$$

Für die Löcher finden wir ein etwas komplizierteres Ergebnis

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3k \left\{ \Theta\left(E_F^{(h)} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{HH}} \right) + \Theta\left(E_F^{(h)} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{LH}} \right) \right\}$$

$$= \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_{eff} \; E_F^{(h)}}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

mit der effektiven Masse

$$m_{eff} = \left(m_{HH}^{3/2} + m_{LH}^{3/2} \right)^{2/3} \qquad (5.19)$$

d.h.

$$E_F^{(h)} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_{eff}}$$

$$k_F^{(HH)} = \sqrt{\frac{m_{HH}}{m_{eff}}}\; k_F$$

$$k_F^{(LH)} = \sqrt{\frac{m_{LH}}{m_{eff}}}\; k_F \qquad (5.20)$$

Wir sehen aus der Gleichung (5.20) sofort, daß sich der Hauptanteil der Löcher im HH-Band befindet, da

$$n_\lambda = \frac{1}{3\pi^2}\left(k_F^{(\lambda)}\right)^3$$

ist. Aus diesem Grund hat das LH-Band keinen nennenswerten Einfluß auf die Ramanspektren.

Wir lassen nun noch sämtliche Wechselwirkungen außer Acht (Einteilchenanregungen) und betrachten ein Experiment, in dem der Impuls q an das elektronische System übertragen wird.

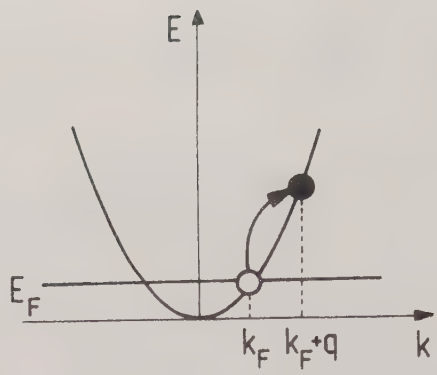


Abbildung 13.

Die maximale Energie, die dabei an das System abgegeben werden kann, ist dann (siehe Abbildung 13)

$$\Delta E_{MAX} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[(k_F+q)^2 - k_F^2\right] = \frac{\hbar^2}{2m}\left[2k_F q + q^2\right] \qquad (5.21)$$

Im mehrdimensionalen Fall ergibt sich

$$\Delta E_{MAX} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[2|\vec{k}_F||\vec{q}| + q^2\right]$$

da $$MAX(\vec{k}_F \cdot \vec{q}) = |\vec{k}_F||\vec{q}| \qquad (5.22)$$

ist. Die Fermiwellenzahlen für das HH-Band und das C-Band sind ungefähr gleich ($m_{eff} \approx m_{HH}$). Die maximale Energie, die vom System aufenommen werden kann, wird daher durch das Leitungsband, das die kleinere Bandmasse hat, bestimmt. Das chemische Potential der Elektronen ist aber fast gleich der Fermienergie, sodaß die Betrachtung des entarteten Grenzfalles physikalisch relevante Ergebnisse liefert.

II) Der wechselwirkungsfreie Grenzfall

Nach diesen Vorüberlegungen betrachten wir zunächst die Übergangsrate im wechselwirkungsfreien Grenzfall.

$$\dot{W}^{(0)}_{1\to 2} \propto \frac{|\vec{e}^{(1)}\cdot\vec{e}^{(2)}|^2}{e^{-\beta\omega}-1} \sum_{\lambda} \chi^{0}_{\lambda\lambda}(q,\omega) \qquad (5.23)$$

mit den Intrabandsuszeptibilitäten

$$\chi^{0}_{\lambda\lambda}(q,\omega) = \sum_{k} |\langle \lambda\, k+\tfrac{q}{2} | \lambda\, k-\tfrac{q}{2}\rangle|^2 \frac{f_\lambda(k+\frac{q}{2}) - f_\lambda(k-\frac{q}{2})}{E_\lambda(k+\frac{q}{2}) - E_\lambda(k-\frac{q}{2}) - \hbar\omega - i\gamma}$$

Die Matrixelemente für die an der Streuung beteiligten Bänder haben wir in Abschnitt 3.2 bereits berechnet. Es hatte sich damals ergeben

$$|\langle c\, k+\tfrac{q}{2} | c\, k-\tfrac{q}{2}\rangle|^2 = 2$$

$$|\langle HH\, k+\tfrac{q}{2} | HH\, k-\tfrac{q}{2}\rangle|^2 = 2\left[1-\tfrac{3}{4}\sin^2\beta\right]$$

wobei der Winkel $\beta = \measuredangle(\vec{k}+\vec{q}/2, \vec{k}-\vec{q}/2)$ ist. Für die Winkelfunktion finden wir mit $\theta = \measuredangle(\vec{k},\vec{q})$

$$\sin^2\beta = 1-\cos^2\beta$$

$$= \frac{(\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2})^2(\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2})^2 - \left[(\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2})\cdot(\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2})\right]^2}{(\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2})^2(\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2})^2}$$

$$= \frac{k^2q^2(1-\cos^2\theta)}{(k^2+\frac{q^2}{4})^2 - k^2q^2\cos^2\theta} \qquad (5.24)$$

Dieser Beitrag ist proportional zu q^2, d.h. der Anteil, der von der Winkelfunktion verursacht wird, verschwindet im Imaginärteil der dielektrischen Funktion

$$\epsilon'' = - V_q \chi^{0\,''}$$

im Limes $q \to 0$. Er hat aus diesem Grund nur geringes Gewicht. Für das LH-Band ergibt sich selbst mit der Abschätzung

$$|\langle LH\ k+\tfrac{q}{2} \,|\, LH\ k-\tfrac{q}{2} \rangle|^2 \leq \frac{3}{2} \qquad (5.24a)$$

kein nennenswerter Beitrag. Die entscheidenden Anteile der Ramanstreuung kommen also vom C- und HH-Band für

$$|\langle \lambda\ k+\tfrac{q}{2} \,|\, \lambda\ k-\tfrac{q}{2} \rangle|^2 = 2$$

Man kann daher für die Behandlung der Intrabandstreuung mit gutem Gewissen die Lindhardfunktion verwenden. Diese Tatsache ist sicher ein Grund für den Erfolg dieser Formel.

Zur Berechnung der Lindhardfunktion wählen wir zunächst spektroskopische Einheiten, d.h. alle Energien werden in Einheiten von

$$E_{o\lambda} = \frac{2 m_\lambda c^2}{\epsilon_\infty} \qquad (5.25)$$

gemessen und alle Wellenzahlen in Inversen der Länge

$$a_{o\lambda} = \frac{\hbar \sqrt{\epsilon_\infty}}{2 m_\lambda c} \qquad (5.26)$$

(m_λ ist dabei die Bandmasse). Die vom Lichtfeld aufgenommene Energie ist dann

$$E = |\vec{q}_1| - |\vec{q}_2|$$

und der Impuls

$$\vec{q} = \vec{q}_1 - \vec{q}_2$$

Zur Berechnung des Integrals legen wir die z-Achse unseres Koordinatensystems in $\vec{q}$-Richtung

$$I_L = \int d^3k \left\{ f(\vec{k}-\tfrac{\vec{q}}{2}) - f(\vec{k}+\tfrac{\vec{q}}{2}) \right\} \delta\left((\vec{k}+\tfrac{\vec{q}}{2})^2 - (\vec{k}-\tfrac{\vec{q}}{2})^2 - E \right)$$

$$= \frac{\hbar T}{2q} \int_{\frac{E^2}{4q^2T}}^{\infty} dx \left\{ \frac{1}{1+c(-E)e^x} - \frac{1}{1+c(E)e^x} \right\}$$

wobei

$$c(E) = \exp\left[\left(\frac{q^2}{4} + \frac{E}{2} - \mu \right) / T \right]$$

Mit

$$z(E) = \left[(E+q^2)^2 - 4q^2\mu \right] / 4q^2 \qquad (5.28)$$

erhalten wir schließlich (siehe auch [63]).

$$I_L = \frac{\hbar T}{2q} \ln \left| \frac{1+e^{-|z(-E)|/T}}{1+e^{-|z(E)|/T}} \right| + \frac{\hbar}{2q} \left\{ \Theta(-z(E))\, z(E) - \Theta(-z(-E))\, z(-E) \right\} \qquad (5.29)$$

Im Grenzfall T=0 gewinnen wir damit die Ergebnisse von Lindhard [58] zurück. Mit

$$V_0 = q^2 \frac{2\pi V_q}{(2\pi)^3 E_0 a_0^3} = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_\infty}} \qquad (5.30)$$

finden wir

$$\Pi^{H} = \frac{V_0}{q^2} I_L$$

$$= \frac{\pi V_0}{2q^3} \begin{cases} Z(E) - Z(-E) & \text{für } Z(E) < 0 \\ -Z(-E) & \text{für } Z(-E) < 0 < Z(E) \\ 0 & \text{für } Z(-E) > 0 \end{cases} \qquad (5.31)$$

Für $Z(-E)>0$, d.h. $E>2k_f q+q^2$ können - wie wir gesehen hatten - aufgrund des Pauli-Prinzips keine Übergänge mehr stattfinden (5.22). Natürlich ist dann

$$\dot{W}^{(0)}_{1\to 2} = 0$$

Für T=0 finden wir den Realteil leicht durch eine Kramers-Kronig Transformation.[17] Mit

$$F(E) = (q^2+2k_F q+E)(q^2-2k_F q+E)\, \ln\left|\frac{q^2+2k_F q+E}{q^2-2k_F q+E}\right|$$

---

[17] Dieses Verfahren ist wegen der analytischen Eigenschaften der retardierten Greenschen Funktionen (siehe Anhang A1) der direkten Berechnung äquivalent.

finden wir

$$\Pi'(E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \, \frac{\Pi''(E')}{E'-E}$$

$$= \frac{V_0}{2q^3} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \, \Theta(-z(E'))\, z(E') \left\{ \frac{1}{E'-E} + \frac{1}{E'+E} \right\}$$

$$= V_0 \left\{ \frac{k_F}{q^2} + \frac{1}{8q^5} \left(F(E) + F(-E) \right) \right\} \qquad (5.32)$$

III) Eigenmoden

In Abbildung 14 auf Seite 74 sind Real- und Imaginärteil der Intrabandpolarisation aufgetragen.

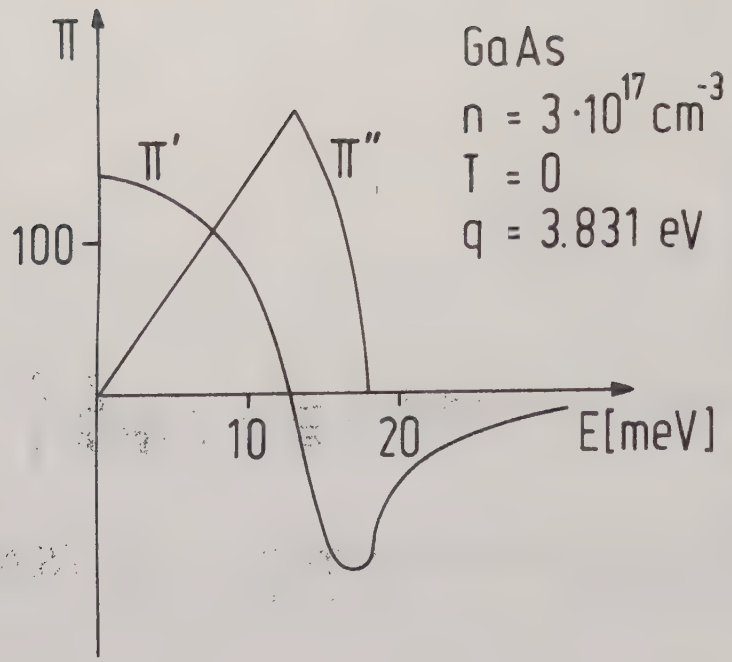


Abbildung 14. Intrabandpolarisation

Bei Vernachlässigung der Elektron-Phonon Wechselwirkung gilt die Gleichung (5.14), sodaß wir bei

$$1 + \Pi' = 0$$

$$\Pi'' = 0 \qquad (5.33)$$

(ungedämpfte) Eigenmoden im System finden. Es sind (longitudinale) Plasmaschwingungen, die Plasmonen. Zur Berechnung ihrer Dispersionsrelation führen wir eine Hochfrequenzentwicklung - $E>2k_f+q^2$ - im Realteil der Polarisationsfunktion Π' durch ([60],[61]).

$$\Pi' = \frac{V_0}{q^2} \int d^3k \; \frac{f(\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}) - f(\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2})}{2\vec{k}\vec{q} - E}$$

$$= -\frac{V_0}{Eq^2} \int d^3k \left\{ f(\vec{k}-\tfrac{\vec{q}}{2}) - f(\vec{k}+\tfrac{\vec{q}}{2}) \right\} \left[1 + \frac{2\vec{k}\vec{q}}{E} + \left(\frac{2\vec{k}\vec{q}}{E}\right)^2 + \dots \right]$$

Aus Symmetriegründen ($\vec{k} \leftrightarrow -\vec{k}$) verschwinden die geraden Potenzen innerhalb der Reihe, sodaß wir mit

$$g_{1/2} = 2\vec{k}\vec{q} \pm q^2$$

$$\Pi' = -\frac{V_0}{Eq^2} \int d^3k \; f(\vec{k}) \left\{ \frac{1}{E}(g_1 - g_2) + \frac{1}{E^3}(g_1^3 - g_2^3) + \dots \right\}$$

$$= -\frac{2V_0}{E^2} \int d^3k \; f(\vec{k}) \left\{ 1 + \frac{12(\vec{k}\cdot\vec{q})^2}{E^2} + O(q^4) \right\} \qquad (5.34)$$

erhalten. Für die nullte Ordnung finden wir die Plasmafrequenz

$$E_{pe}^2 = 2V_0 \int d^3k \; f(k) = \frac{8\pi}{3} V_0 \, k_F^3 \qquad (5.35)$$

In erster Ordnung ergibt sich für den entarteten Grenzfall (T=0)[18]

$$O_1 = \frac{24 V_0 q^2}{E^2} \int d^3k \, (kz)^2 f(k) = E_{pe}^2 \, \frac{12}{5} \left(\frac{k_F q}{E}\right)^2 \qquad (5.36)$$

---

[18] Für endliche Temperaturen ergibt sich das Fermiintegral

$$O_1 = \frac{48 V_0 q^2}{3E^2} F_{3/2}(\mu/T)$$

Zusammen ergibt sich schließlich

$$\Pi' = -\frac{E_{pe}^2}{E^2}\left\{1 + \frac{12}{5}\left(\frac{k_F q}{E}\right)^2 + O(q^4)\right\} \qquad (5.37)$$

Im Fall mehrerer Bänder ($\Pi' = \Sigma\ \Pi_i'$) normieren wir nicht mehr auf die Bandmasse [(5.25),(5.26)], sondern auf die Masse m_0 der freien Elektronen und messen die Bandmassen - wie üblich - in Einheiten von m_0. Es ergibt sich dann

$$E_i = \frac{E}{m_i} \quad , \quad q_i = \frac{q}{m_i} \quad , \quad q_{F_i} = \frac{q_F}{m_i}\,\Delta_i$$

und mit (5.20)

$$\Delta_c = 1 \quad , \quad \Delta_{HH} = \sqrt{\frac{m_{HH}}{m_{eff}}} \quad , \quad \Delta_{LH} = \sqrt{\frac{m_{LH}}{m_{eff}}}$$

Für die Plasmafrequenz erhalten wir somit [33]

$$E_{pe}^{*2} = \frac{E_{pe}^2}{m^*}$$

wobei

$$m^* = \left[\sum_i \frac{\Delta_i^3}{m_i}\right]^{-1} \qquad (5.38)$$

Als Endergebnis finden wir im Mehrbandfall

$$\Pi' = -\frac{E_{pe}^{*2}}{E^2}\left\{1 + \Gamma\,\frac{12}{5}\left(\frac{k_F q}{E}\right)^2 + O(q^4)\right\}$$

$$\Gamma = m^* \left(\sum_i \frac{\Delta_i^5}{m_i^3} \right) \qquad (5.39)$$

ein ähnliches Ergebnis wie im Einbandfall. Die Lage der Plasmafrequenz E_{pl}^* wird durch die effektive Masse m^* bestimmt. Wenn der Massenunterschied zwischen den schweren und den leichten Löchern groß ist ($m_{eff} \approx m_{HH}$), tragen die leichten Löcher kaum bei[19] ,da

$$\frac{\Delta_{LH}^3}{m_{LH}} = \frac{\Delta_{LH}}{m_{eff}} \approx \frac{\Delta_{LH}}{m_{HH}} \ll \frac{1}{m_{HH}}$$

$$\frac{\Delta_{HH}^3}{m_{HH}} \approx \frac{1}{m_{HH}}$$

$$\frac{\Delta_c^3}{m_c} \approx \frac{1}{m_c}$$

ist. Die entscheidenden Beiträge kommen von den Elektronen aus dem Leitungsband. Zur Berechnung der Plasmonendispersion entwickeln wir den Realteil der Polarisationsfunktion Π' in der Nähe der Plasmafrequenz und erhalten

$$\Pi' \approx \Pi'_D = - \frac{E_{pc}^*(q)^2}{E^2} \qquad (5.40)$$

mit der Plasmonendispersion (siehe auch [35])

---

[19] Dabei ist das Matrixelement (5.24a) ja noch nach oben abgeschätzt worden.

$$E_{pe}^{*}(q) = E_{pe}^{*}\left\{1 + r\,\frac{6}{5}\left(\frac{k_F q}{E_{pe}^{*}}\right)^2\right\} \qquad (5.41)$$

Im Einbandfall finden wir dieses Ergebnis schon bei Pines [60], bei Vernachlässigung der Impulsabhängigkeiten ergibt sich die Drude-Formel.

Im nächsten Schritt wollen wir die Elektron-Phonon Wechselwirkung mitberücksichtigen. Wegen (5.15) suchen wir jetzt nach den longitudinalen Moden[20]

$$\epsilon(q,\omega) = \epsilon_{ph}(\omega) + \Pi'(q,\omega)$$

$$\approx \epsilon_{ph}(\omega) + \Pi_D'(q,\omega) = 0 \qquad (5.42)$$

In dieser Näherung reduziert sich das Problem auf die Lösung der biquadratischen Gleichung

$$E^2\left(E^2 - E_{LO}^2\right) - E_{pe}^{*2}\left(E^2 - E_{TO}^2\right) = 0$$

$$E_{\pm}^2 \approx \frac{E_{LO}^2 + E_{pe}^{*2}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_{LO}^2 + E_{pe}^{*2}}{2}\right) - E_{TO}^2 E_{pe}^{*2}} \qquad (5.43)$$

Die beiden Moden $E_{\pm}$ bezeichnet man als die Plasmon-Phonon-Moden [12]. Wir bestimmen zunächst ihre Asymptoten. Im Niederdichtegrenzfall finden wir

---

[20] Es ist seit langem bekannt, daß sich in RPA die Polaristionsfunktionen addieren.

$$E_\pm^2 \approx \frac{E_{LO}^2 + E_{pe}^{*2}}{2} \pm \frac{E_{LO}^2}{2}\left\{1 + \frac{E_{pe}^{*2}}{E_{LO}^2}\left(\frac{E_{LO}^2 - 2E_{TO}^2}{E_{LO}^2}\right)\right\}$$

d.h.

$$E_+^2 \approx E_{LO}^2$$

$$E_-^2 \approx E_{pe}^{*2}\,\frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0} \qquad (5.44)$$

Wir erkennen, daß die Plasmafrequenz im Niederdichtegrenzfall mit $\sqrt{\varepsilon_0}$ abgeschirmt wird. (Auch beim Polaritonenproblem wird die Photonenenergie mit $\sqrt{\varepsilon_0}$ abgeschirmt). Im Hochdichtegrenzfall ergibt sich

$$E_\pm^2 \approx \frac{E_{LO}^2 + E_{pe}^{*2}}{2} \pm \frac{E_{pe}^{*2}}{2}\left\{1 + \frac{E_{LO}^2 - 2E_{TO}^2}{E_{pe}^{*2}}\right\}$$

d.h.

$$E_+^2 \approx E_{pe}^{*2}$$

$$E_-^2 \approx E_{TO}^2 \qquad (5.45)$$

In Abbildung 15 auf Seite 80 sind die Ergebnisse dargestellt.

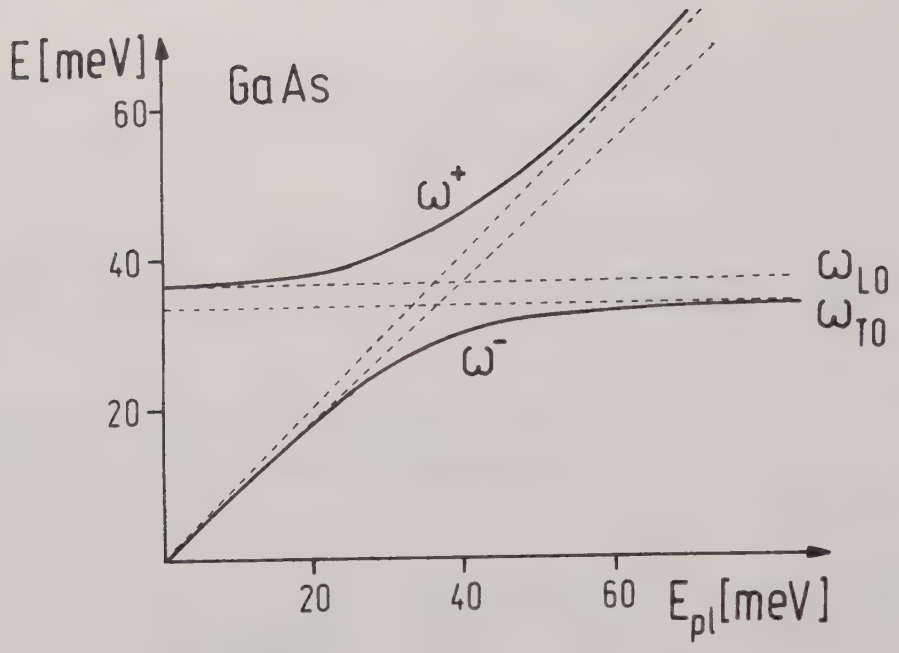


Abbildung 15. Plasmon-Phonon-Moden

Im Kreuzungsbereich der Moden - dort wo die Plasmon-Phonon Übergänge resonant werden - findet eine Abstoßung der beiden Moden $E_{\pm}$ statt. Die Longitudinal-Transversal Aufspaltung zieht die Existenz unterschiedlicher Asymptoten im Hoch- und Niederdichtegrenzfall nach sich. (Diese Tatsache ist beim Polariton seit langem bekannt).

IV) Landau-Dämpfung

Zur Einbeziehung der Dämpfung kehren wir zunächst wieder zur Gleichung (5.14) zurück. Wir linearisieren die dielektrische Funktion in der Umgebung der Plasmonenfrequenz,d.h.

$$\epsilon'(q,\omega) = \epsilon'(q,\omega_{pe}) + (\omega-\omega_{pe}) \left.\frac{d\epsilon'}{d\omega}\right|_{\omega_{pe}} + \dots$$

und

$$\epsilon''(q,\omega) = \epsilon''(q,\omega_{pe}) + (\omega-\omega_{pe}) \left.\frac{d\epsilon''}{d\omega}\right|_{\omega_{pe}} + \dots$$

An der Eigenmode war - wie wir gesehen hatten - $\varepsilon'(q,\omega_{pl})=0$, während wir nun annehmen, daß $\varepsilon''(q,\omega_{pl})=\gamma$ nicht verschwindet. In führender Ordnung können wir dann den zweiten Anteil im zweiten Ausdruck vernachlässigen, so daß

$$\dot{W}_{1\to 2} \propto -\,\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\omega-\omega_{pe}+i\gamma}\right] = \frac{\gamma}{(\omega-\omega_{pe})^2+\gamma^2} \qquad (5.46)$$

eine Lorentzlinie der Breite γ ist. Im Grenzfall $\gamma\to 0$ erhalten wir die Diracsche Deltafunktion, die in den Ergebnissen als Lorentzlinie verschwindender Breite aufzufassen ist. Dieser Befund ist aus dem Experiment wohlbekannt. Für große Dämpfungen γ bricht diese Näherung zusammen, es machen sich Asymmetrien in den Linienformen bemerkbar, da die ersten Glieder der Taylorreihe die Funktion ε' innerhalb der Breite γ nicht mehr richtig beschreiben (siehe (5.46)). Eine analytische Beschreibung der dielektrischen Funktion ist dann nicht mehr sinnvoll, da es genauso schwierig ist, Ableitungen der dielektrischen Funktion zu berechnen wie die Funktion selbst.

Nach diesen Vorüberlegungen werfen wir nochmals einen Blick auf Abbildung 14 auf Seite 74. Bei den Energien $E<2k_f q+q^2$ werden intrinsische Dämpfungsmechanismen wirksam, Plasmonen können in Einteilchenanregungen zerfallen. Da die Energie aus den Einteilchenanregungen (Quasikontinuum) sofort durch Elektron-Elektron Wechselwirkung abtransportiert werden

kann, bewirkt dieser Prozess eine starke Dämpfung der Plasmonenmode. Man bezeichnet dieses Phänomen als Landau-Dämpfung [64].

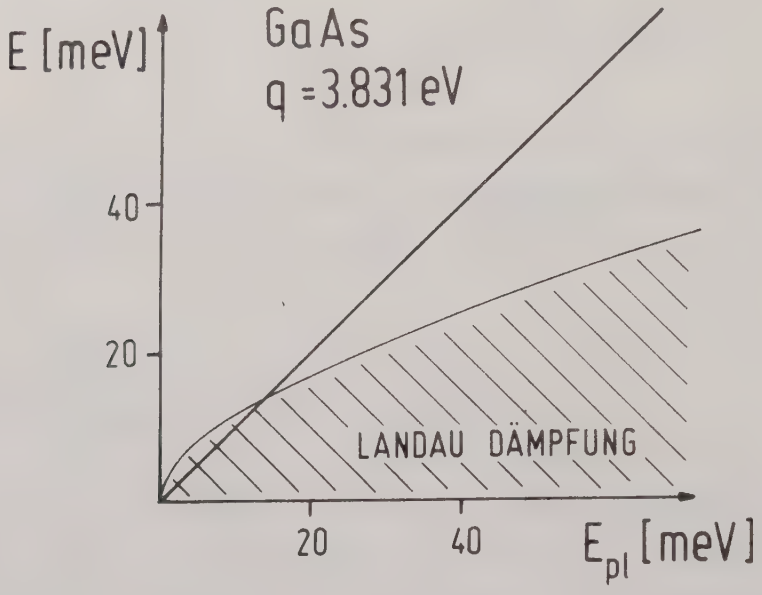


Abbildung 16. Landaudämpfung: Die von der Dämpfung erfassten Bereiche sind schraffiert eingezeichnet.

Für die kritische Energie E_c, bei der Plasmonenfrequenz der Landau-Dämpfung entkommt, ergibt sich in Abhängigkeit von der Plasmafrequenz

$$\left(E_{pe} \propto \sqrt{n} \;,\; k_F \propto \sqrt[3]{n} \right)$$

$$E_{pe,c}(q) = \alpha(q)\; E_{pe}(0)^{2/3} + \frac{q^2}{m_c}$$

mit $$\alpha = \frac{2q}{m_c}\left(\frac{8\pi}{3m^*}\, V_0\right)^{-1/3} \qquad (5.47)$$

Wir linearisieren die Gleichung (5.47) bezüglich der Wellenzahl q -es gilt ja $q \ll k_f$ - und erhalten damit

$$E_{pe,c} = \alpha^3 \tag{5.48}$$

Die Philosophie dieser Näherung ist aus Abbildung 17 ersichtlich.

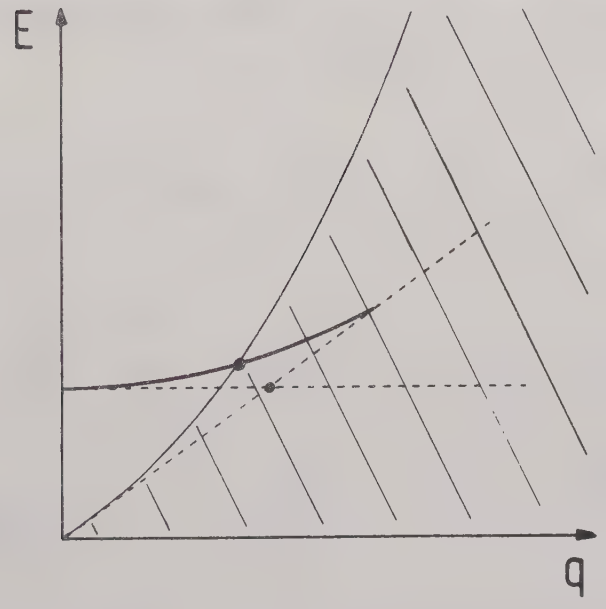


Abbildung 17.

Sowohl die Plasmonendispersion als auch die Kurve, die den Rand des Bereichs der Einteilchenanregungen beschreibt, werden nur bis zur Ordnung O(q) mitgenommen.[21]

Bei Mitberücksichtigung der Elektron-Phonon-Kopplung treten jetzt wieder die gekoppelten Plasmon-Phonon-Moden auf. Die Berechnung der kritischen Dichten für das Einsetzen und Aufhören der Landau-Dämpfung wird allerdings kaum schwieriger.
Zur Berechnung von E_{p1} nähern wir E_- durch die mit $\sqrt{\varepsilon_0}$ abgeschirmte Plasmafrequenz an. Zur Berechnung von E_{p2} verwenden wir hingegen die Asymptote $E_- \simeq E_{TO}$. Es ergibt sich (siehe (5.47))

$$E_{p_1} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty}}\ \alpha\ E_{p_1}^{2/3}$$

$$E_{p_1} = \left(\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty}}\ \alpha\right)^3 \qquad (5.49)$$

und

$$E_{p_2} = \left(\frac{E_{TO} - q^2}{\alpha}\right)^{3/2} \qquad (5.50)$$

In Abbildung 19 sind Ergebnisse für GaAs dargestellt. Aufgetragen sind für verschiedene Dichten n die Übergangsrate in Abhängigkeit von der

---

[21] Es ist in diesem Zusammenhang nicht sinnvoll, die Näherung weiterzutreiben, da zum einen in dem betrachteten Energiebereich die Drudenäherung langsam zusammenbricht, zum anderen - wie man in Abbildung 14 auf Seite 74 sieht - durch temperaturbedingtes Ausschmieren der Kanten die Landau-Dämpfung nicht ganz klar einsetzt [65].

Energieverschiebung $\Delta\omega$. Wir erkennen, daß bei $n \approx 10^{17} cm^{-3}$ die ω^--Mode aus der Landau-Dämpfung freikommt, um bei $n \approx 10^{18} cm^{-3}$ wieder durch die Landau Dämpfung zu verschwinden. (siehe Abbildung 18)[22] Mit wachsender Dichte werden die kollektiven Moden immer dominanter, da die Effizienz der Abschirmung zunimmt. Diese Tatsache ist für Metalle seit langem bekannt.

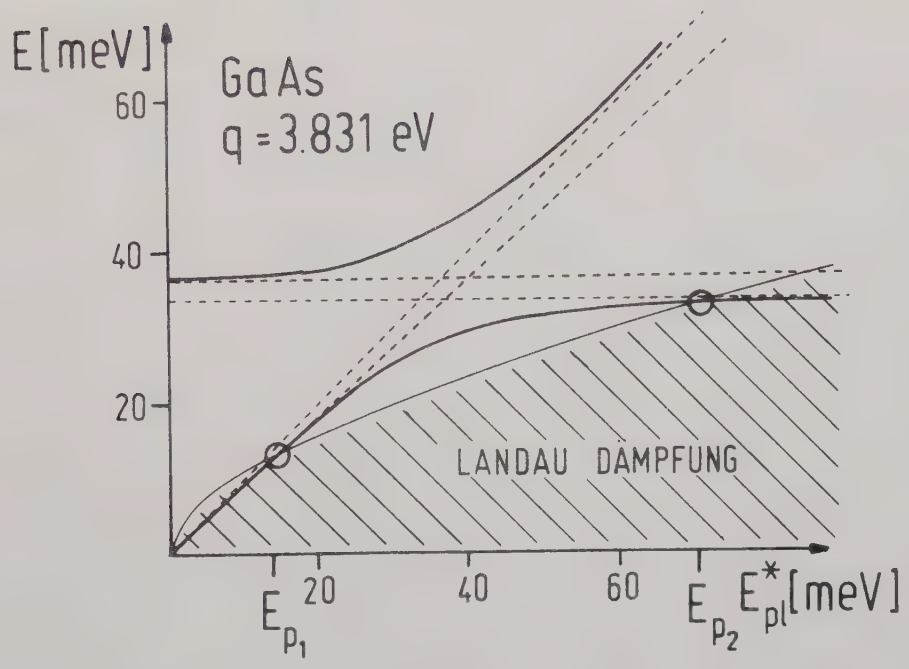
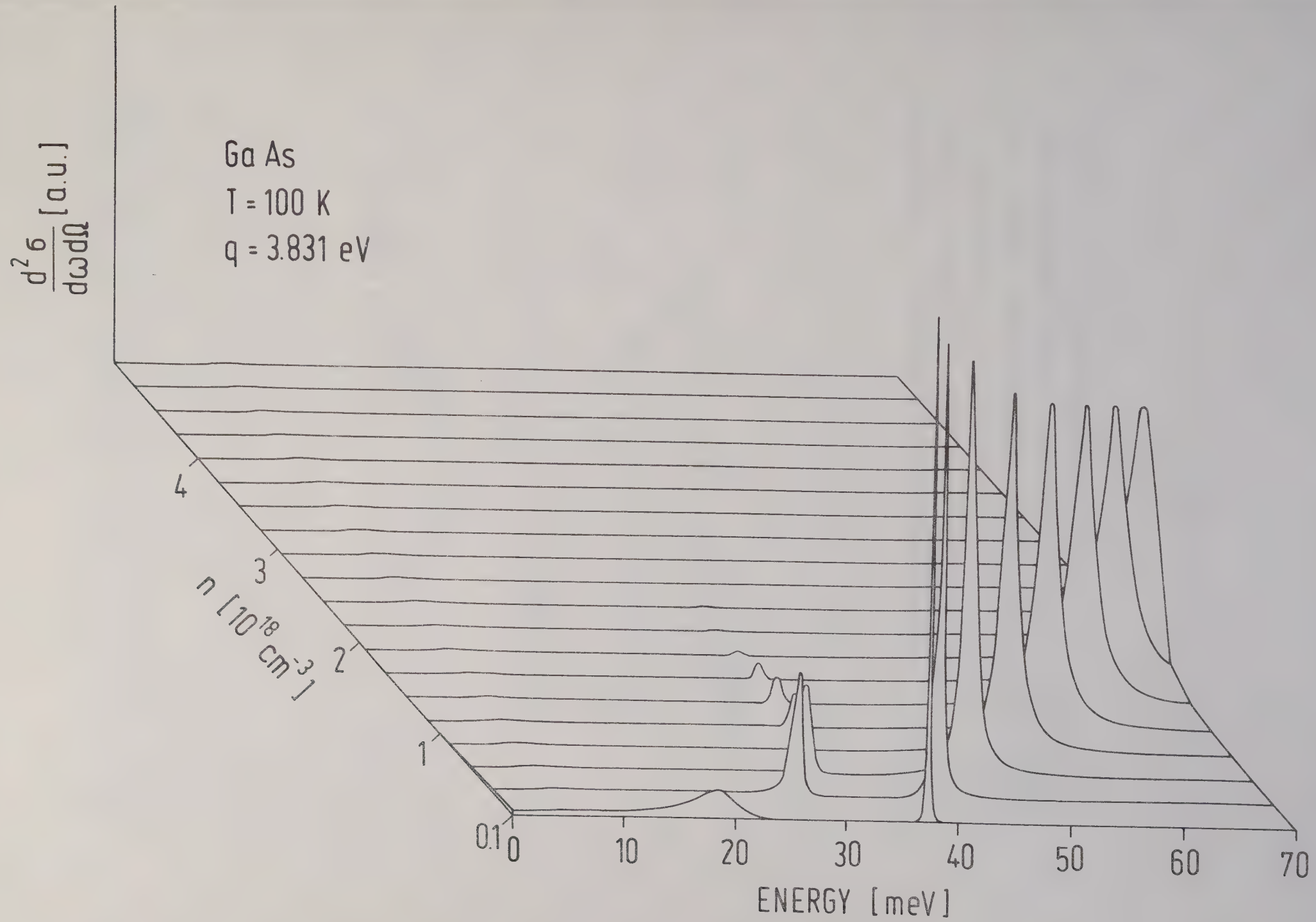


Abbildung 18. Landaudämpfung der Plasmon-Phonon-Moden

---

[22] Bei dieser Rechnung sind die Intervalenzbandübergänge mitberücksichtigt, da die ω_+-Mode sonst scharf wird und nicht mehr graphisch dargestellt werden kann.


Ga As
T = 100 K
q = 3.831 eV
$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega}$ [a.u.]
n [10^{18} cm^{-3}]
0.1
1
2
3
4
0
10
20
30
40
50
60
70
ENERGY [meV]

5.2 INTERVALENZBANDÜBERGÄNGE

Wir hatten in Abschnitt 5, Kapitel 1.III gesehen, daß intrinsisch Dämpfung dadurch zustandekommt, daß Plasmon-Phonon-Moden in Intrabandanregungen zerfallen können (Landau-Dämpfung). Das Ziel dieses Abschnittes ist es nun, die Dämpfungen zu untersuchen, die durch den Zerfall der Plasmon-Phonon-Moden in Intervalenzbandanregungen auftreten.

I) Drudefall

Abbildung 19. Ramanspektren für GaAs

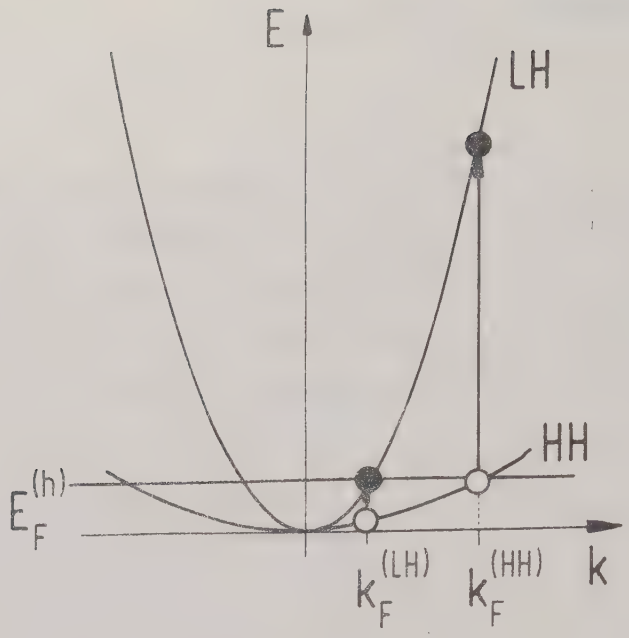


Abbildung 20. HH- und LH-Band

Wir wenden uns hierzu fürs erste dem Spezialfall verschwindenden Impulsübertrages zu. Wie wir in Abbildung 20 sehen, ist dieser Grenzfall nicht sinnlos. Während nämlich bei den Intrabandübergängen der Impulsübertrag q=0 zwangsläufig den Energieübertrag E=0 zur Folge hat, treten im Interbandfall durchaus bei q=0 Übergänge mit nichtverschwindendem Energieübertrag auf. Der Fall endlicher Impulsüberträge (siehe 2.II) liefert dann (leichte) Korrekturen zu den hier gefundenen Ergebnissen. Desweiteren betrachten wir zunächst wieder den entarteten Grenzfall (T=0)[23] , das chemische Potential ist also genau die Fermienergie $E_f^{(h)}$

---

[23] Diese Annahme ist für konkrete Vergleiche nicht gerechtfertigt, da das chemische Potential der Löcher bei den interessanten Dichten und Temperaturen negativ ist. Die folgenden Überlegungen sollen allerdings auch nur einen groben Anhalt liefern.

der Löcher. Für den minimalen und den maximalen Energieübertrag finden wir (siehe Abbildung 19 auf Seite 86)

$$E_{MIN} = \frac{\hbar^2 k_F^{(LH)^2}}{2} \left\{ \frac{1}{m_{LH}} - \frac{1}{m_{HH}} \right\} = \frac{m_{LH}}{m_{red}} E_F^{(h)}$$

$$E_{MAX} = \frac{\hbar^2 k_F^{(HH)^2}}{2} \left\{ \frac{1}{m_{LH}} - \frac{1}{m_{HH}} \right\} = \frac{m_{HH}}{m_{red}} E_F^{(h)} \qquad (5.51)$$

wobei

$$m_{red} = \frac{m_{HH} m_{LH}}{m_{HH} - m_{LH}} \qquad (5.52)$$

die reduzierte Masse ist. Wenn wir den grossen Massenunterschied zwischen den schweren und den leichten Löchern in Rechnung stellen, so finden wir

$$\frac{m_{LH}}{m_{red}} = \frac{m_{HH} - m_{LH}}{m_{HH}} \approx 1$$

$$\frac{m_{HH}}{m_{red}} = \frac{m_{HH} - m_{LH}}{m_{LH}} \gg 1$$

Die untere Kante des Fensters, das durch die beiden Grenzenergien E_{min} und E_{max} bestimmt wird, ist von der Grössenordnung der Fermienergie der Löcher, die Oberkante wird hingegen durch das Massenverhältnis m_{HH}/m_{LH} bestimmt. Diese Tatsache ist unmittelbar einsichtig, wenn man die Abbildung 21 betrachtet.

Zur qualitativen Untersuchung der Intervalenzbandübergänge betrachten wir die Einteilchenspektren.

Im Unterschied zur Intrabandstreuung ist

$$E_{MIN/MAX} \propto k_F^2 \propto E_{pe}^{4/3}$$

d.h.

$$E_{MAX} = \alpha \; E_{pe}^{4/3}$$

$$E_{MIN} = \alpha \; \frac{m_{LH}}{m_{HH}} \; E_{pe}^{4/3}$$

mit

$$\alpha = \frac{m_{HH}}{m_{eff} \; m_{red}^2} \left(\frac{8\hbar}{3m^*} V_0 \right)^{-2/3} \qquad (5.54)$$

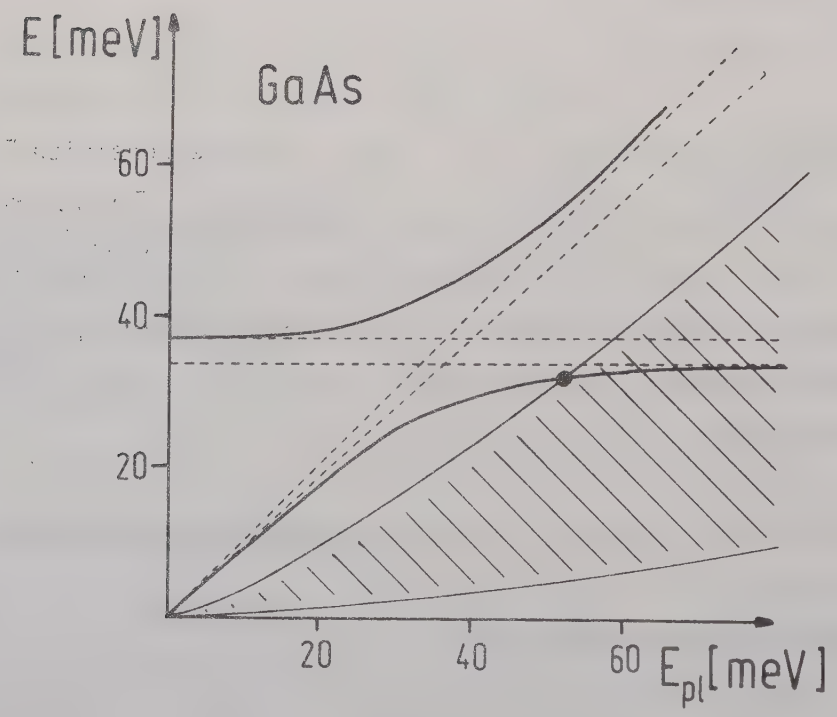


Abbildung 21. Intervalenzbandanregungen

Wir finden für die vier wichtigen Punkte

$$E_{p1} = \left(\frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0}} \right)^3$$

$$E_{p2} = \left(\frac{E_{LO}}{\alpha} \right)^{3/4}$$

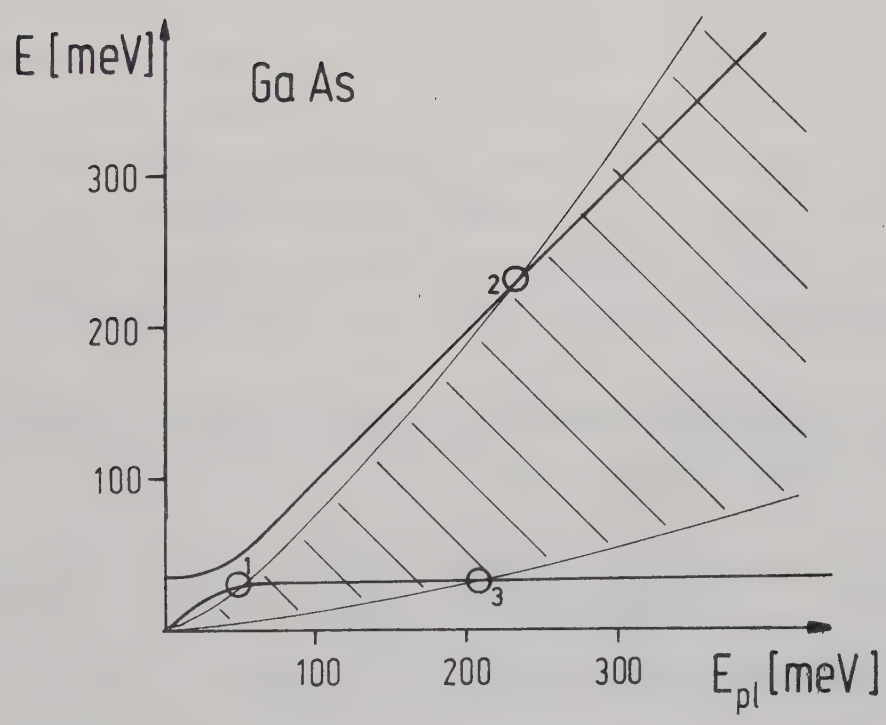


Abbildung 22. Intervalenzbandanregungen

$$E_{p3} = \left(\frac{m_{HH}\, E_{TO}}{m_{LH}\, \alpha} \right)^{3/4}$$

$$E_{p4} = \left(\frac{m_{HH}}{\alpha\, m_{LH}} \right)^{3} \qquad (5.55)$$

Die Punkte 3 und 4 liegen bei Dichten $n>10^{18}cm^{-3}$, die man in keinem Lichtstreuexperiment je erreichen wird. Auch die Bedeutung der Dichte 1 ist gering, da sie im Bereich der Landau-Dämpfung liegt (siehe Abbildung 18 auf Seite 85). Der Punkt 2 ist der einzig physikalisch wichtige - für GaAs führt er zu einer Dichte von $n \approx 3*10^{17}cm^{-3}$. Infolge der Thermalisierung der Löcher (es gilt immer $\mu<0$ im Experiment) ist das Einsetzen der Dämpfung jedoch nicht so abrupt wie das der Landau-Dämpfung.

Nach diesen Vorüberlegungen berechnen wir nun den Intervalenzbandanteil der Polarisationsfunktion (HH=1, LH=2)

$$\Pi_{inter}(q,E) = \Pi_{12}(q,E) + \Pi_{21}(q,E) \qquad (5.56)$$

Durch eine kleine Einsetzübung in (5.9) sehen wir, daß

$$\Pi_{21}(q,E) = \Pi_{12}(q,-E)^{*} \qquad (5.57)$$

Damit ergibt sich die Symmetriebeziehung

$$\Pi_{inter}(q,-E) = \Pi_{inter}(q,E)^{*} \quad , \tag{5.58}$$

die ein Ausdruck des detaillierten Gleichgewichts [73] ist. Da

$$E_{HH}(k) - E_{LH}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2}\left\{\frac{1}{m_{LH}} - \frac{1}{m_{HH}}\right\} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_{red}}$$

ist, verwenden wir in der Näherung (5.25) und (5.26) die reduzierte Masse m_{red}. Mit (5.9) und (3.30) ergibt sich im Drudefall (q=0)

$$\Pi_{12}(0,E) = -\lim_{q\to 0} \frac{V_0}{q^2}\int d^3k \, \sin^2\beta \, \frac{f_2(\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}) - f_1(\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2})}{E_2(\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}) - E_1(\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}) + E + i\delta} \tag{5.59}$$

Zur Integration legen wir die z-Achse unseres Koordinatensystems wieder in die Richtung des Impulsübertrages $\vec{q}$ (d.h. $\theta = \sphericalangle(\vec{k},\vec{q})$), so daß wir wegen $\beta = \sphericalangle(\vec{k}+\vec{q}/2, \vec{k}-\vec{q}/2)$ finden (siehe (5.24))

$$\sin^2\beta = \frac{k^2 q^2 (1-\cos^2\theta)}{(k^2+\frac{q^2}{4})^2 - k^2 q^2 \cos^2\theta}$$

Wir erhalten schließlich[24]

$$\Pi_{12}(0,E) = -2\pi V_0 \int_{-1}^{1} dz\,(1-z^2)\int_0^\infty dk \, \frac{f_2(k)-f_1(k)}{E-k^2+i\delta}$$

$$= \frac{2\pi}{3} V_0 \int_0^\infty \frac{dy}{\sqrt{y}} \, \frac{f_2(\sqrt{y}) - f_1(\sqrt{y})}{y - E + i\delta} \tag{5.60}$$

---

[24] Dieses Integral verschwindet natürlich nicht wie der entsprechende Intrabandanteil, da die beiden Bandmassen verschieden sind, d.h. $f_2(k)-f_1(k)\neq 0$.

Dabei sind $f_i(k)$ noch die Verteilungsfunktionen der Elektronen. Vom Blickwinkel der Löcher - $f_i^{(h)}(k)=1-f_i(k)$ - ergibt sich für den Imaginärteil

$$\Pi_{12}''(0,E) = \frac{2\pi^2}{3} V_0 \frac{\Theta(E)}{\sqrt{E}} \left\{ f_1^{(h)}(\sqrt{E}) - f_2^{(h)}(\sqrt{E}) \right\} \qquad (5.61)$$

und

$$\Pi_{inter}'(0,E) = \Pi_{12}(0,E)'' - \Pi_{12}''(0,-E) \qquad (5.62)$$

wobei

$$f_i^{(h)}(\sqrt{E}) = \left\{ \exp\left[\left(\frac{m_{red}}{m_i} |E| - \mu_h \right) / T \right] + 1 \right\}^{-1} \qquad (5.63)$$

die Fermiverteilungsfunktion der Löcher im Band i ist. Im entarteten Grenzfall (T=0)

$$f_1^{(h)}(\sqrt{E}) - f_2^{(h)}(\sqrt{E}) = \Theta\left(\frac{m_1}{m_{red}} E_F^{(h)} - E \right) - \Theta\left(\frac{m_2}{m_{red}} E_F^{(h)} - E \right)$$

gewinnen wir die Ergebnisse der kinematischen Überlegungen zurück. Wir können in diesem einfachen Fall auch den Realteil der Interbandpolarisation bestimmen.

$$\Pi_{inter}'(0,E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{E} \, \frac{\Pi_{inter}''(0,\tilde{E})}{\tilde{E} - E}$$

$$= \frac{2}{\pi} \int_{0}^{\infty} d\tilde{E} \, \frac{\tilde{E}\, \Pi_{12}''(0,\tilde{E})}{\tilde{E}^2 - E^2}$$

$$= \frac{4}{3} V_0 \left\{ \frac{1}{2} \ln\left| \frac{\sqrt{E} + \sqrt{\tilde{E}}}{\sqrt{E} - \sqrt{\tilde{E}}} \right| - \operatorname{arctan} \sqrt{\frac{\tilde{E}}{E}} \right\}_{\frac{m_2}{m_{red}} E_F^{(h)}}^{\frac{m_1}{m_{red}} E_F^{(h)}} \qquad (5.64)$$

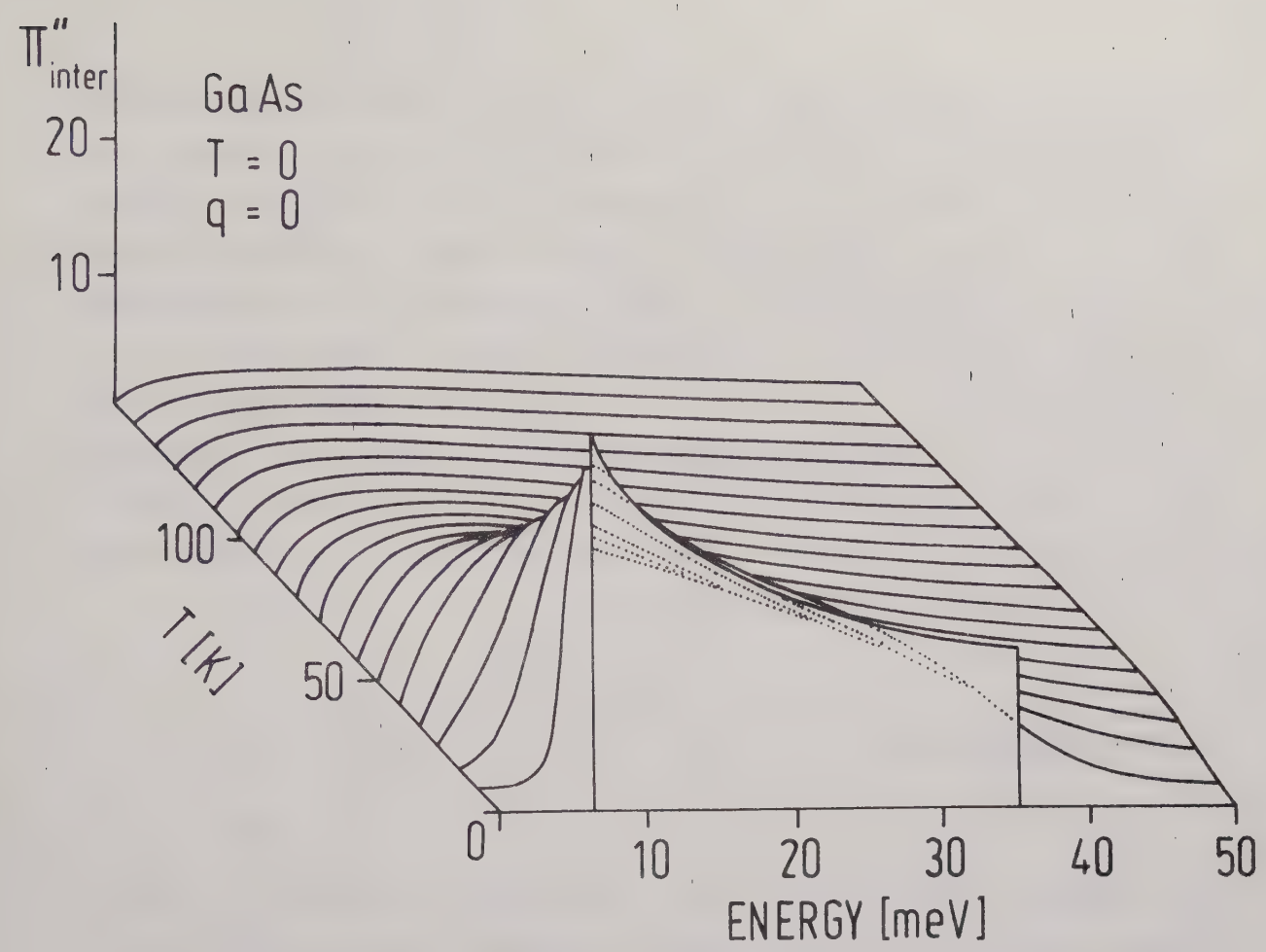


Abbildung 24. Imaginärteil Π''_{inter}

In Abbildung 23 auf Seite 96 sind Real- und Imaginärteil der Intervalenzbandpolarisation für T=0 dargestellt.
Wie wir in Gleichung (5.64) sehen, treten bei den beiden Grenzenergien E_{min} und E_{max} logarithmische Singularitäten im Realteil der Intervalenzbandpolarisation auf. Dieses Verhalten ist ein Artefakt des entarteten Grenzfalles. Es verschwindet für endliche Temperaturen.
In Abbildung 24 ist der Imaginärteil der Intervalenzbandpolarisation für GaAs ($n=3*10^{17}cm^{-3}$) bei verschiedenen Temperaturen dargestellt. Wir erkennen, daß das ursprünglich klare Fenster rasch ausschmiert. Der Grund hierfür liegt in der Tatsache, daß das chemische Potential der Löcher bereits bei kleinen Temperaturen negativ wird.

II) Der allgemeine Fall

Im allgemeinen Fall mit endlichem Impulsübertrag wird gegenüber dem Drudefall (q=0) zunächst der minimale Energieübertrag kleiner und der maximale Energieübertrag grösser, wie wir in Abbildung 25 sehen.

Insbesondere verschwindet der minimale Energieübertrag, wenn der Impulsübertrag $q=|\vec{q}|=k_f^{(HH)}-k_f^{(LH)}$ den Abstand zwischen den Rändern der beiden Fermikugeln für die leichten (LH) und schweren (HH) Löcher erreicht. Wir legen nun einen Schnitt an, sodaß der Impulsübertrag in der Schnittebene liegt (Abbildung 26). Wie wir in Abbildung 25 auf Seite 100 gesehen hatten, gehört der Energieübertrag E=0 zu Übergängen vom Rand der LH-Fermikugel zur HH-Fermikugel.
Aus Abbildung 26 lesen wir ab, daß diese Bedingung (E=0) im Intervall

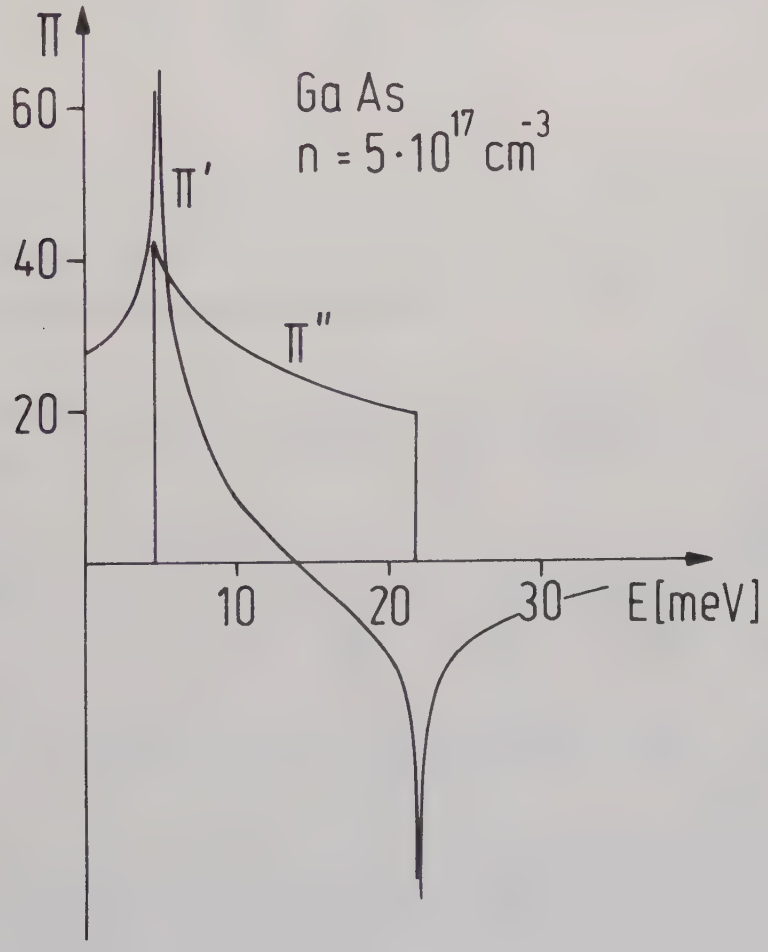


Abbildung 23. Intervalenzpolarisation

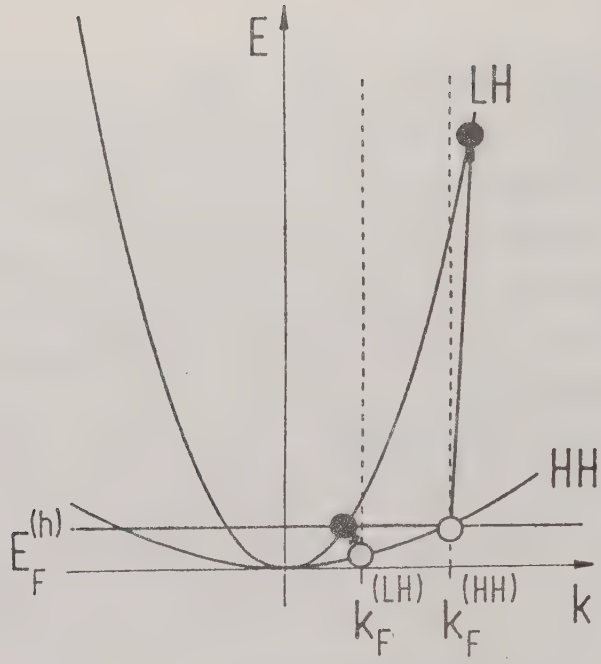


Abbildung 25. HH- und LH-Band

erfüllt werden kann. Damit gewinnen wir folgendes Ergebnis für die Ränder des Einteilchenspektums.

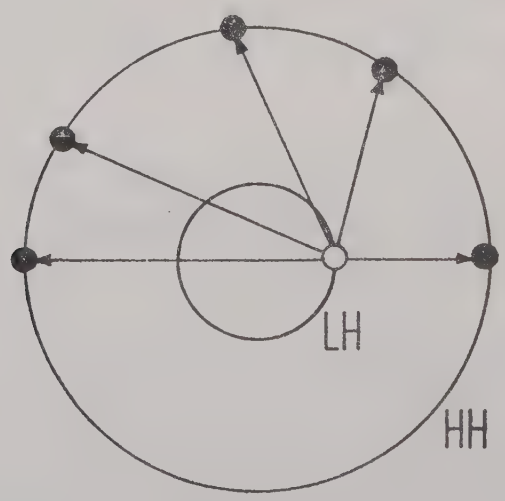


Abbildung 26. Schnitt durch die Fermikugeln

$$E_{MAX} = \frac{\hbar^2 (k_F^{(HH)} + q)^2}{2 m_{LH}} - E_F^{(h)}$$

$$E_{MIN} = \begin{cases} E_F^{(h)} - \frac{\hbar^2}{2m_{HH}} \left(k_F^{(LH)} + q\right)^2 & \text{für} \quad q \leq k_F^{(HH)} - k_F^{(LH)} \\ 0 & \text{für} \quad k_F^{(HH)} - k_F^{(LH)} \leq q \leq k_F^{(HH)} + k_F^{(LH)} \\ \frac{\hbar^2}{2m_{HH}} \left(k_F^{(LH)} - q\right)^2 - E_F^{(h)} & \text{für} \quad q \geq k_F^{(HH)} + k_F^{(LH)} \end{cases} \quad (5.65)$$

Für q=0 erkennen wir das Fenster, das sich in Kapitel 2.I ergeben hatte. Im Ramanexperiment können wegen der Steilheit der Lichtgeraden nur die Bereiche in der Nähe des Ursprungs erreicht werden.

Wir berechnen zunächst den Imaginärteil der Polarisationsfunktion und anschließend durch eine Kramers-Kronig Transformation deren Realteil

$$\overline{\Pi}_{12}^{\parallel}(\vec{q}, E) = \frac{\pi V_0}{q^2} \int d^3k \, \sin^2\beta \left\{ f_1^{(h)}\left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}\right) - f_2^{(h)}\left(\vec{k} - \frac{\vec{q}}{2}\right) \right\} \delta(g(\vec{k}))$$

mit

$$g(\vec{k}) = \frac{m_{red}}{m_2} \left(\vec{k} - \frac{\vec{q}}{2}\right)^2 - \frac{m_{red}}{m_1} \left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}\right)^2 - E \qquad (5.66)$$

Wir betrachten das Integral (5.66) in Kugelkoordinaten ($\vec{e}_z \| \vec{q}$) und benutzen die Delta-Distibution, um die k-Integration auszuwerten. Das Problem ist vom Typ

$$\int_a^b dk\, f(k)\, \delta(g(k)) = \sum_i \frac{f(k_i)}{|g'(k_i)|}$$

Im Itoformalismus sind k_i die einfachen, reelen Nullstellen der Funktion $g=g(k)$ im Intervall $(a,b]$. Um den Schwierigkeiten, die durch die Berücksichtigung der Intervallgrenzen zustandekommen, aus dem Wege zu gehen, machen wir uns die Symmetrie des Integranden

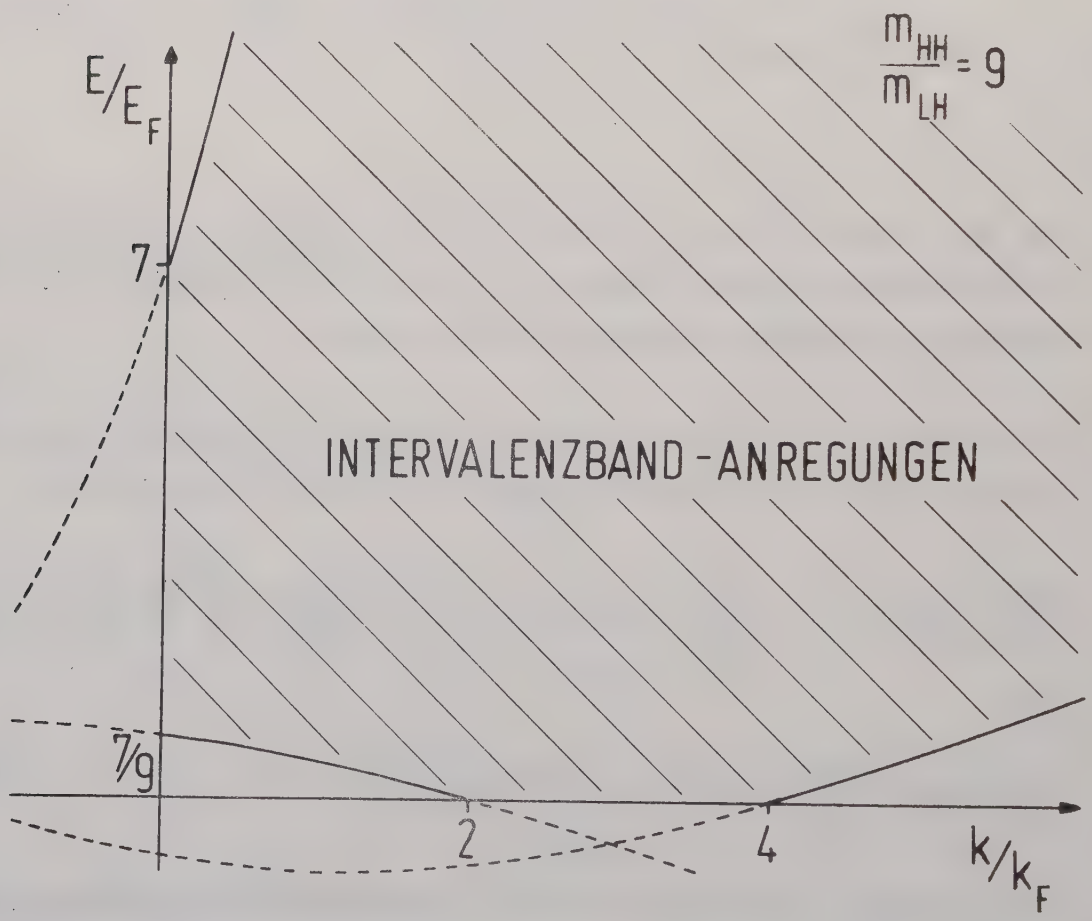


Abbildung 27. Intervalenzbandanregungen

$$F(k,z) = \sin^2\beta \left\{ f_1^{(h)}(\vec{k}+\tfrac{\vec{q}}{2}) - f_2^{(h)}(\vec{k}-\tfrac{\vec{q}}{2}) \right\} \delta(g(\vec{k}))$$

$$= F(-k,-z)$$

zunutze. Damit ergibt sich

$$\int_0^\infty dk \int_{-1}^{1} dz \; F(k,z) = \int_0^\infty dk \int_0^1 dz \left\{ F(k,z) + F(k,-z) \right\}$$

$$= \int_{-\infty}^{0} dk \int_0^1 dz \left\{ F(k,z) + F(k,-z) \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^1 dz \int_{-\infty}^{\infty} dk \left\{ F(k,z) + F(k,-z) \right\} \qquad (5.68)$$

Nachdem wir nun das Integral (5.66) in die gewünschte Form gebracht haben, untersuchen wir die Nullstellen der Funktion (siehe (5.66))

$$g(k,z) = k^2 - \Gamma q z k + \frac{q^2}{4} - E$$

$$? \; |g'(k,z)| = |2k - \Gamma q z|$$

mit $\Gamma = \dfrac{m_1+m_2}{m_1-m_2} \geq 1$

Die Funktion g(k,z) ist ein Polynom 2.Grades bezüglich der Variablen k. Sie hat damit entweder zwei oder keine einfachen reelen Nullstellen.

$$k_{1/2}(z) = \Gamma \frac{qz}{2} \pm \sqrt{\left(\Gamma \frac{qz}{2}\right)^2 - \frac{q^2}{4} + E}$$

$$= - k_{2/1}(-z) \qquad (5.69)$$

Die Diskriminante

$$\eta(z) = \left(r\,\frac{qz}{2}\right)^2 - \frac{q^2}{4} + E \geq 0$$

muß positiv sein, damit die Nullstellen $k_{1/2}$ reel sind. Damit stellen wir an die Integrationsvariable z die Bedingung

$$z^2 \geq \frac{1}{r}\left\{1 - \frac{4E}{q^2}\right\} \qquad (5.70)$$

Durch die Ungleichung (5.70) wird die z-Integration in (5.68) auf das Intervall $a(E) \leq z \leq 1$ eingeschränkt. Die untere Integralgrenze ist dabei

$$a(E) = \begin{cases} 1 & \text{für } E \leq \frac{q^2}{4}(1-r^2) \\ \frac{2}{qr}\sqrt{\frac{q^2}{4} - E} & \text{für } \frac{q^2}{4}(1-r^2) \leq E \leq \frac{q^2}{4} \\ 0 & \text{für } E \geq \frac{q^2}{4} \end{cases} \qquad (5.71)$$

Mit (5.68) und (5.69) finden wir jetzt für den Imaginärteil der Polarisationsfunktion (5.66)

$$\overline{\Pi}_{12}(\vec{q}, E) = \int_{a(E)}^{1} dz \left\{ G(k_1, z) + G(k_2, z) \right\}$$

mit

$$G(k, z) = \frac{\hbar^2 V_0}{q^2} \sin^2\beta \; \frac{f_1^{(h)}(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}) - f_2^{(h)}(\vec{k} - \frac{\vec{q}}{2})}{\sqrt{\left(r\,\frac{qz}{2}\right)^2 - \frac{q^2}{4} + E}} \qquad (5.72)$$

Im Grenzfall $q \to 0$ gewinnen wir das Ergebnis (5.61) zurück. Für endliche Wellenzahlen kann das Integral (5.72) nur noch numerisch ausgewertet werden.

Abbildung 28 zeigt den Imaginärteil der Intervalenzbandpolarisation für verschiedene Wellenzahlen k. Er nimmt für wachsendes k rasch ab, sodaß in Abbildung 28 eine Vergrösserung gewählt Die Maxima der ersten Kurven sind daher nicht dargestellt. Wir erkennen, daß sich das Fenster mit wachsender Wellenzahl rasch verbreitert, wie wir es aus den kinematischen Überlegungen Abbildung 27 erwartet hatten.

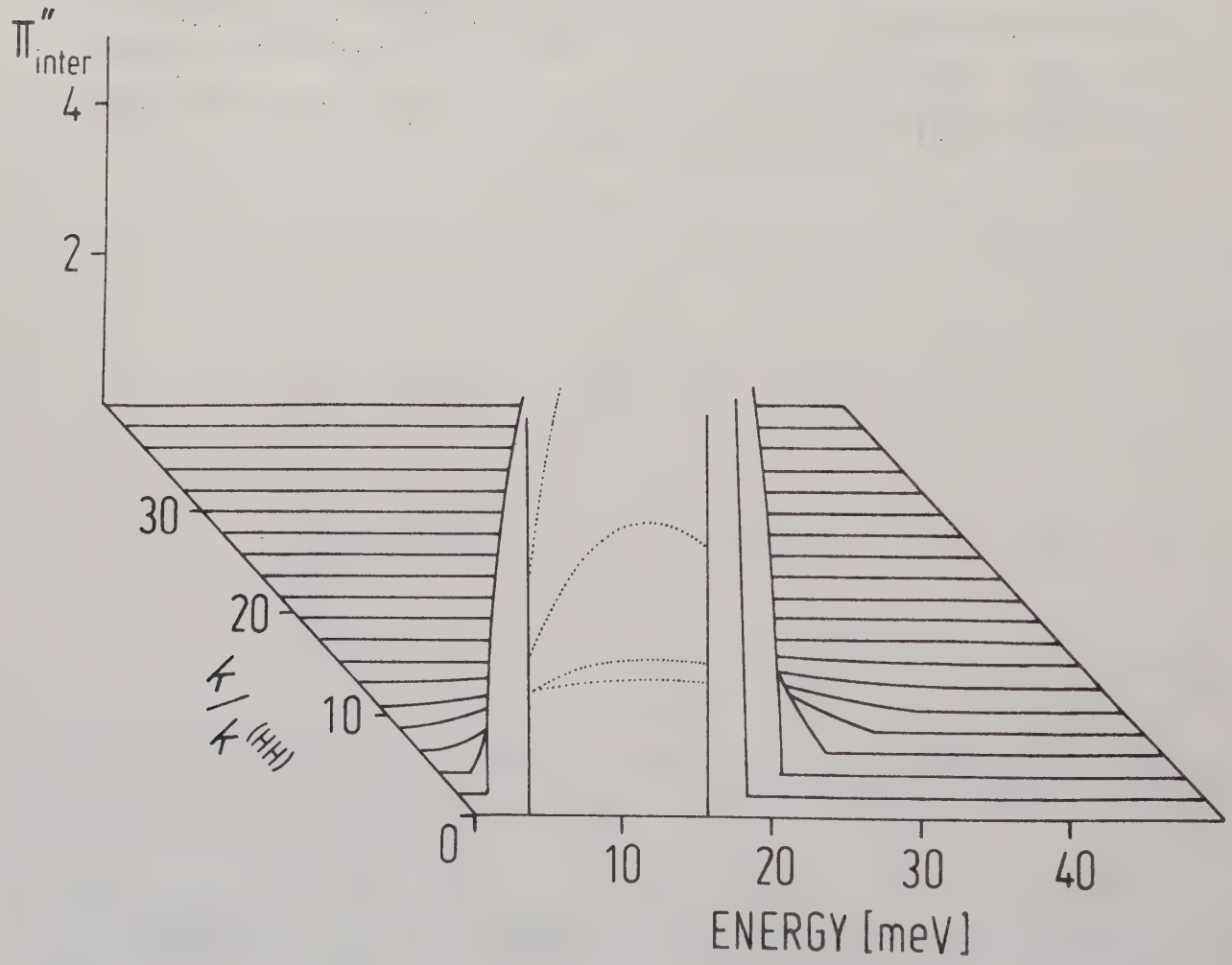


Abbildung 28. Imaginärteil Π''_{inter}

6. STREUUNG DURCH DIE $\vec{j}\vec{A}$-KOPPLUNG

Die Anteile der Übergangsrate, die durch die $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung verursacht werden, sind ungleich schwieriger zu gewinnen als die durch die ρA^2-Kopplung verursachten. Die Symmetrie des Problems, die sich schon in Abschnitt 2.3 gezeigt hat, legt die Berechnung der 3-fach retardierten Greenschen Funktionen in einem 2-Schritt Verfahren nahe (Abbildung 29). Im ersten Schritt werden die Fouriertransformierten der retardierten Operatoren R bezüglich der Zeiten τ_1 und τ_2 berechnet. Anschließend wird im zweiten Schritt die Fouriertransformation bezüglich der Zeit t durchgeführt. Es zeigt sich dabei, daß wegen des unterschiedlichen Bahndrehimpulses für die Valenzb&ander und das Leitungsband die Mechanismen der Abschirmung nicht wirksam werden. Zu demselben Ergebnis gelangte auch Jha [25] durch Berechnung der Einteilchendichtematrix. Da im Rahmen dieser Arbeit die Impulsabhängigkeiten der optischen Matrixelemente (siehe Abschnitt 3.3) mitberücksichtigt werden, müssen die Übergangsraten vollständig neu berechnet werden. In den Kapitel 6.1-6.3 werden Ergebnisse für verschiedene experimentelle Situationen angegeben.

Im ersten Schritt eliminieren wir die Zeiten τ_1 und τ_2 zugunsten der Frequenzen Ω_1 und Ω_2. Dazu bilden wir die Ableitung des Operators R bezüglich der Zeit τ und führen eine Fouriertransformation der Bewegungsgleichung durch. Die Phononenvariable wird nach demselben Verfahren, das wir bereits in Abschnitt 5 angewandt hatten, eliminiert, d.h.

$$V(q,\omega) = V_q / \epsilon_{ph}(\omega) \tag{6.1}$$

Es ergibt sich

$$R_{\lambda_4\ldots\lambda_1}(k_2,k_2-q_2,k_1,k_1+q_1|\Omega,t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, e^{i\Omega\tau} R_{\lambda_4\ldots\lambda_1}(k_2,k_2-q_2,k_1,k_1+q_1|t,t-\tau) =$$

$$= \frac{\mathcal{J}_{\lambda_4\lambda_3}(k_2,k_2-q_2|t)\,\mathcal{J}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1,k_1+q_1|t)}{E_{\lambda_1}(k_1+q_1)-E_{\lambda_2}(k_1)-\hbar\Omega-i\delta} +$$

$$+ V(q_1,\Omega)\,\chi^{0}_{\lambda_1\lambda_2}(k_1+q_1,k_1|\Omega) \sum_{\substack{Q\\ \mu_1\mu_2}} R_{\lambda_4\lambda_3\mu_2\mu_1}(k_2,k_2-q_2,Q,Q+q_1|\Omega,t) \qquad (6.2)$$

Aus Gleichung (2.30) sehen wir das die retardierten Operatoren R bei der eingestrahlten Frequenz ω_1 bzw. bei der Frequenz ω_2 des Streulichts betrachtet werden. In der Suszeptibilität $\chi^0_{\lambda\mu}(k+q,k|\ \Omega)$ sind bei diesen Energien (eV) nur noch die Interbandanteile relevant. In Abschnitt 3, Kapitel 2.II hat sich jedoch gezeigt, daß die Matrixelemente $\langle\lambda k+q|\lambda k\rangle$ sehr klein sind. (Für GaAs ist beispielsweise das relevante Matrixelement $|\langle Sok|Ck+q\rangle|^2 \approx 10^{-2} \ll 1$). Es ergibt sich somit

$$R_{\lambda_4\ldots\lambda_1}(k_2,k_2-q_2,k_1,k_1+q_1|\Omega,t) = \frac{\mathcal{J}_{\lambda_4\lambda_3}(k_2,k_2-q_2|t)\,\mathcal{J}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1,k_1+q_1|t)}{E_{\lambda_1}(k_1+q_1)-E_{\lambda_2}(k_1)-\hbar\Omega-i\delta}$$

und analog

$$R^{(+)}_{\lambda_8\ldots\lambda_5}(k_4,k_4+q_4,k_3,k_3-q_3|\Omega,t) = \frac{\mathcal{J}_{\lambda_8\lambda_7}(k_4,k_4+q_4|t)\,\mathcal{J}_{\lambda_6\lambda_5}(k_3,k_3-q_3|t)}{E_{\lambda_7}(k_4+q_4)-E_{\lambda_8}(k_4)-\hbar\Omega-i\delta} \qquad (6.3)$$

Wir berechnen nun die retardierte Greensche Funktion

$$\langle\langle \mathcal{J}_{\lambda_8\lambda_7}(k_4,k_4+q_4|t)\,\mathcal{J}_{\lambda_6\lambda_5}(k_3,k_3-q_3|t)\,|\,\mathcal{J}_{\lambda_4\lambda_3}(k_2,k_2-q_2|0)\,\mathcal{J}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1,k_1+q_1|0)\rangle\rangle_{\Delta\omega+i\delta}$$

Abbildung 29. Berechnungsschema

$$\ll \mathcal{J}_{\lambda_8\lambda_7}(k_4, k_4+q_4 \,|\, t-\tau_1)\, \mathcal{J}_{\lambda_6\lambda_5}(k_3, k_3-q_3 \,|\, t) \;\Big|\; \mathcal{J}_{\lambda_4\lambda_3}(k_2, k_2-q_2 \,|\, 0)\, \mathcal{J}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1, k_1+q_1 \,|\, 0-\tau_2) \gg_{\Omega_1\Omega_2\Delta\omega}$$

<u>1. SCHRITT</u>

$$\begin{array}{ccc}
R^{(+)}_{\lambda_8\ldots\lambda_5}(k_4, k_4+q_4, k_3, k_3-q_3 \,|\, t-\tau_1, t) & & R_{\lambda_4\ldots\lambda_1}(k_2, k_2-q_2, k_1, k_1+q_1 \,|\, 0, 0-\tau_2) \\
\text{FT bez. } \tau_1 \;\Big\downarrow & & \Big\downarrow \;\text{FT bez. } \tau_2 \\
R^{(+)}_{\lambda_8\ldots\lambda_5}(k_4, k_4+q_4, k_3, k_3-q_3 \,|\, \Omega_1, t) & & R_{\lambda_4\ldots\lambda_1}(k_2, k_2-q_2, k_1, k_1+q_1 \,|\, \Omega_2, 0)
\end{array}$$

<u>2. SCHRITT</u>

$$\begin{array}{c}
\ll \cdots\cdots \,|\, \cdots\cdots \gg_{\Omega_1\Omega_2 t} \\
\Big\downarrow \;\text{FT bez. } t \\
\ll \cdots\cdots \,|\, \cdots\cdots \gg_{\Omega_1\Omega_2\Delta\omega}
\end{array}$$

aus ihrer Bewegungsgleichung. Wenden wir uns hierbei zunächst dem kinetischen Term

$$\Delta E = E_{\lambda_8}(k_4) - E_{\lambda_7}(k_4+q_4) + E_{\lambda_5}(k_3) - E_{\lambda_5}(k_5-q_5) \qquad (6.5)$$

zu. Die maßgeblichen Beiträge zur Übergangsrate erhalten wir für $\Delta E=O(meV)$. Nun hatten wir aber bereits gesehen, $E_{\lambda_8}(k_4)-E_{\lambda_7}(k_4+q_4)=O(eV)$ sind, d.h. es muß auch $E_{\lambda_5}(k_3-q_3)-E_{\lambda_6}(k_3)=O(eV)$ sein. Damit ergibt sich folgendes Bild des Streuprozesses (siehe Abbildung 30).

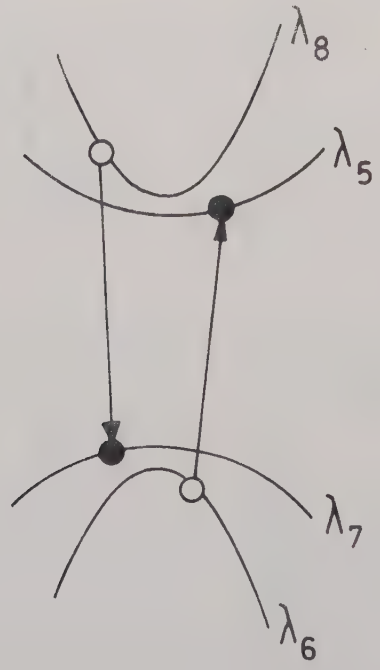


Abbildung 30.

Die Abschirmung durch Elektron-Elektron und Elektron-Phonon Wechselwirkung wird nicht wirksam. Es gibt daher auch keine Plasmon-Phonon Moden aus diesem Prozess. In Abbildung 31 sind Messungen von Nather gezeigt.
In paralleler Polarisation (a) - ρA^2-Kopplung - finden sich Plasmon-Phonon Moden und schwache Einteilchenspektren. In orthogonaler

Polarisation (b) - $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung - fehlen die kollektiven Moden völlig, während die Einteilchenspektren stärker ausgeprägt sind [25].

Zur Berechnung der Inhomogenität betrachten wir als Beispiel den ersten Beitrag der Gleichung (2.32).

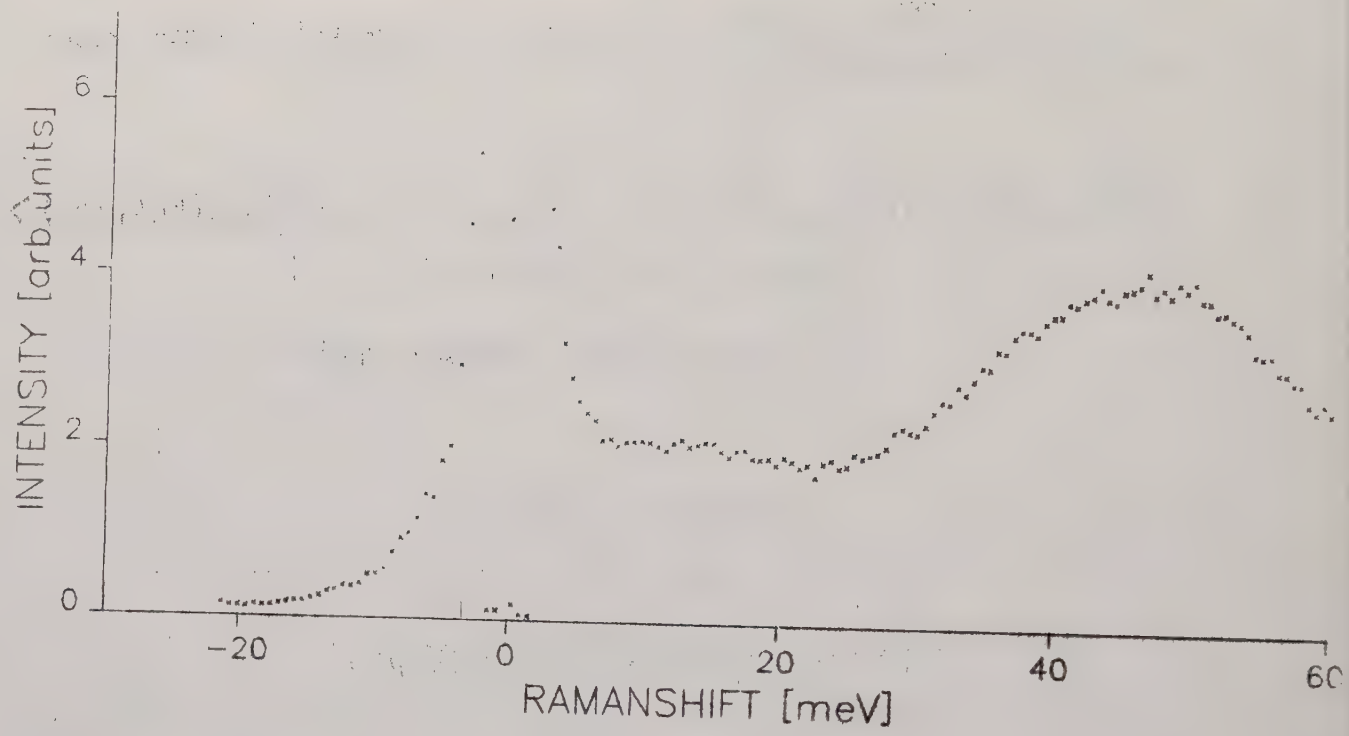
$$
\begin{aligned}
&\langle \tilde{\tilde{J}}_{\lambda_8\lambda_7}(k_4,k_4-q_1)\,\tilde{\tilde{J}}_{\lambda_6\lambda_5}(k_3,k_3+q_2)\,\tilde{\tilde{J}}_{\lambda_4\lambda_3}(k_2,k_2-q_2)\,\tilde{\tilde{J}}_{\lambda_2\lambda_1}(k_1,k_1+q_1)\rangle = \\
&= \underbrace{\underbrace{\underbrace{\cdot\left[1-f_{\lambda_4}(k_2)\right]\delta(\lambda_5,\lambda_4)\,\delta(k_3,k_2-q_2)\cdot}_{\cdot\; f_{\lambda_3}(k_2-q_2)\;\delta(\lambda_6,\lambda_3)\;\cdot}}_{\cdot\left[1-f_{\lambda_2}(k_1)\right]\delta(\lambda_2,\lambda_7)\;\delta(k_4,k_1+q_1)\;\cdot}}_{\cdot\; f_{\lambda_1}(k_1+q_1)\,\delta(\lambda_8,\lambda_1)\left|\langle\lambda_4 k_2|\frac{\vec{p}\,\vec{e}^{(2)}}{\sqrt{m}}|\lambda_3 k_2-q_2\rangle\langle\lambda_2 k_1|\frac{\vec{p}\,\vec{e}^{(1)}}{\sqrt{m}}|\lambda_1 k_1+q_1\rangle\right|^2}
\end{aligned}
\tag{6.6}
$$

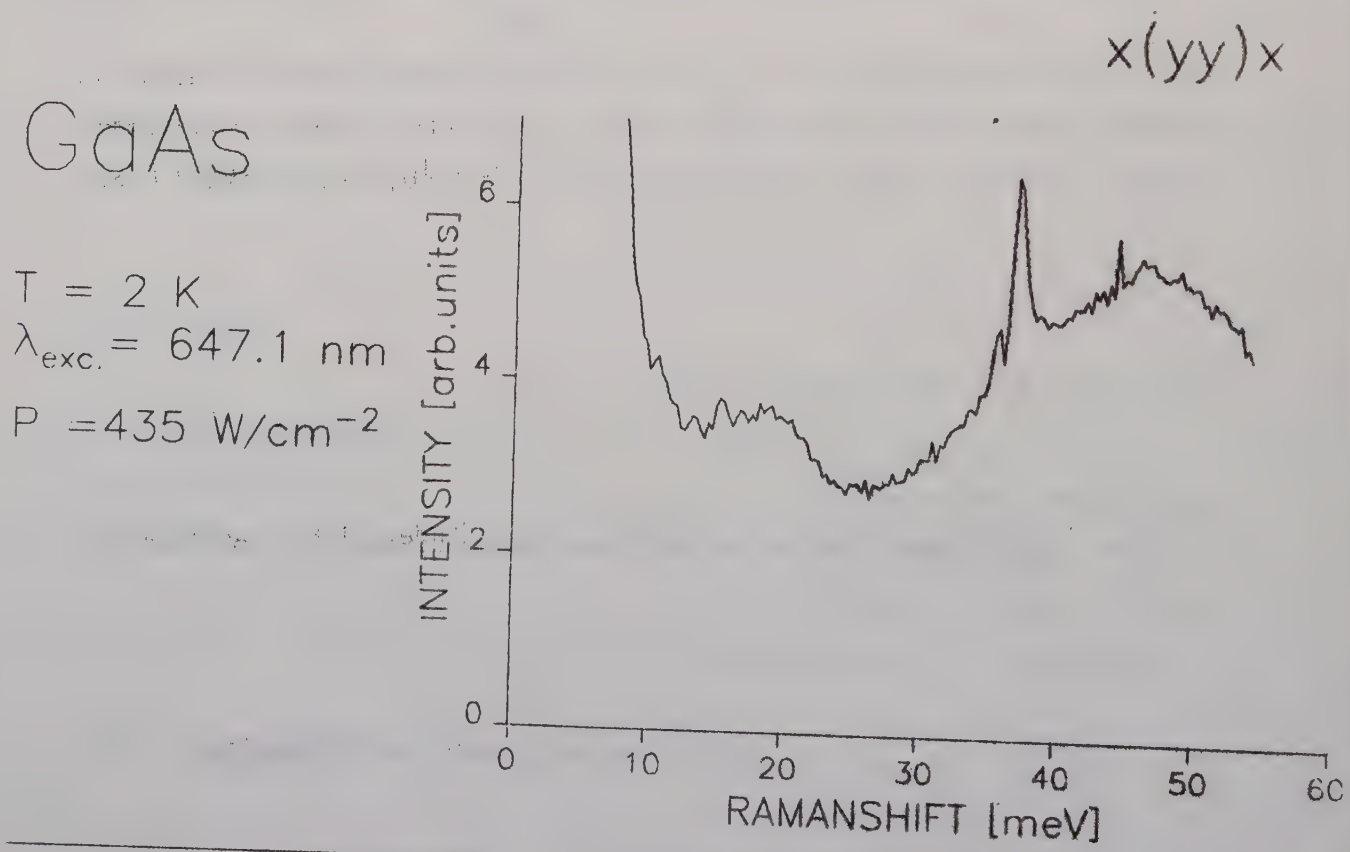
In Einstrahlexperimenten wird, um ein möglichst kaltes Plasma zu erzeugen, die Frequenz des einfallenden Laserlichts in etwa auf den Bandabstand zwischen dem Leitungsband (C) und dem Valenzband (SO)

Abbildung 31: Experimentelle Spektren [37]

---

[25] Eine detaillierte Diskussion der Experimente findet sich im Abschnitt 7.


x(yz)x
INTENSITY [arb.units]
0
2
4
6
-20
0
20
40
60
RAMANSHIFT [meV]


x(yy)x
GaAs
T = 2 K
λexc. = 647.1 nm
P = 435 W/cm-2
INTENSITY [arb.units]
0
2
4
6
0
10
20
30
40
50
60
RAMANSHIFT [meV]

eingestellt. Die wesentlichen Beiträge zum Streuprozess werden dann wegen der Energienenner (6.3) und (6.4) für $\lambda_2=\lambda_3=SO$ und $\lambda_1=\lambda_4=C$ finden.

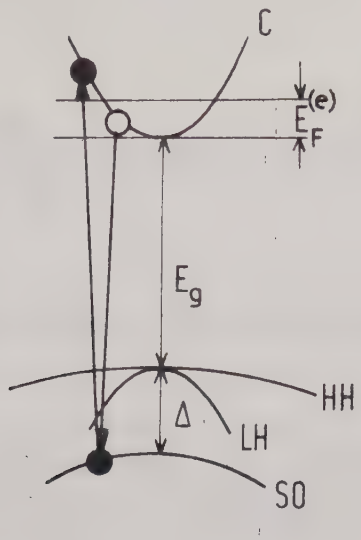


Abbildung 32.

Das SO-Band ist während des gesamten Streuprozesses praktisch gefüllt, d.h. $f_{so}(k)=1$. Beim Herausnehmen eines Teichens entsteht dann genau ein Loch in diesem ansonsten vollen Band, das dann auch wieder gefüllt werden muß, d.h. es muß $k_2=k_1+q_2$ gelten. Wir finden in diesem Fall für die Inhomogenität

$$\langle [J_{\lambda_8\lambda_7}(k_4,k_4-q_1)\, J_{\lambda_6\lambda_5}(k_3,k_3+q_2),\ J_{\lambda_4\lambda_3}(k_2,k_2-q_2)\, J_{\lambda_2\lambda_1}(k_1,k_1+q_1)] \rangle =$$

$$= \delta(\lambda_8,\lambda_5,\lambda_4,\lambda_1,c)\,\delta(\lambda_7,\lambda_6,\lambda_3,\lambda_2,so)\,\delta(k_4,k_1+q_1)\,\delta(k_3,k_2-q_2)\,\delta(k_2,k_1+q_2)\cdot$$

$$\cdot \left| \langle c\, k_1+q_2 | \frac{\vec{p}\,\vec{e}^{(2)}}{\sqrt{m}} | so\, k_1 \rangle \langle so\, k_1 | \frac{\vec{p}\,\vec{e}^{(1)}}{\sqrt{m}} | c\, k_1+q_1 \rangle \right|^2 \cdot$$

$$\cdot \left\{ f_c(k_1+q_1)\left[1-\cancel{f_c(k_1+q_2)}\right] - f_c(k_1+q_2)\left[1-\cancel{f_c(k_1+q_1)}\right] \right\} \qquad (6.8)$$

Wenn wir diesselbe Prozedur mit den anderen Beiträgen in (2.32) durchführen und gleichzeitig bedenken, daß wegen der Energieerhaltung für den Gesamtprozeß die beiden Energienenner (6.3) und (6.4) bis auf das Vorzeichen gleich sein müssen, so erhalten wir

$$\dot{W}^{(2)}_{1\to 2} = \frac{1}{\pi\hbar}\,\frac{-1}{e^{-\beta\Delta\omega}-1} \sum_k \left| O^{(2)}_{so,c} \right|^2 \cdot$$

$$\cdot \frac{f_c(k+q_1) - f_c(k+q_2)}{\left(E_c(k+q_2) - E_{so}(k) - \hbar\omega_2\right)^2}\, \delta\left(E_c(k+q_1) - E_c(k+q_2) - \hbar\Delta\omega\right) \qquad (6.9)$$

Die Summation über die Freiheitsgrade s,s',σ" bezüglich derer die Bandenergien entartet sind ("Spinfreiheitsgrade") ist dabei bereits ausgeführt. Das Matrixelement

$$\left|O^{(2)}_{So,c}\right|^2 = \sum_{ss'} \left| \sum_{\sigma''} \left\{ \langle c\,s\,k+q_2 | \frac{\vec{p}\,\vec{e}^{(1)}}{\sqrt{m}} | So\sigma''k \rangle \langle So\sigma''k | \frac{\vec{p}\,\vec{e}^{(2)}}{\sqrt{m}} | c\,s\,k+q_1 \rangle - \right.\right.$$

$$\left.\left. - \langle c\,s\,k+q_2 | \frac{\vec{p}\,\vec{e}^{(2)}}{\sqrt{m}} | So\sigma''k \rangle \langle So\sigma''k | \frac{\vec{p}\,\vec{e}^{(1)}}{\sqrt{m}} | c\,s\,k+q_1 \rangle \right\} \right|^2$$

$$= 2\Gamma^2 \left| \vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)} \right|^2 \cos^2\left(\vec{k}, \vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)}\right) \qquad (6.10)$$

wurde bereits in Abschnitt 3.3 ausgerechnet. Das Ergebnis (6.9) entspricht dem für freie Teilchen [25], da die Abschirmung über die Elektron-Elektron und die Elektron-Phonon Wechselwirkung, wie wir gesehen hatten, wegen der Auswahlregeln kaum wirksam ist . Berücksichtigt man diese mit, so gelangt man bereits in RPA auf eine Integralgleichung mit nichttrivialem Kern. Desweiteren taucht im Ergebnis (6.9) das die Streuung vermittelnde SO-Band nicht auf. Das hat seinen Grund darin, daß wir es ja als voll vorausgesetzt hatten. Im allgemeinen tritt in der Energieerhaltung der volle Energieübertrag (6.5) auf und sämtliche Verteilungsfunktionen tragen bei. Die gesamte Situation wird dann sehr unübersichtlich.

Wir beschränken uns jedoch auf die einfache Situation (6.9). Die Form der Energieerhaltung zeigt, daß sich dieser Prozess im Experiment als resonanzverstärkter, nichtabgeschirmter Intrabandstreuprozess des Leitungsbandes darstellt. Folglich können die kinematischen Überlegungen des Abschnittes 5.1 Wort für Wort übernommen werden. Zur Berechnung der Übergangsrate führen wir zunächst wieder spektroskopische Einheiten (6.25) und (6.26) mit der Bandmasse des Leitungsbandes ein. Die Integration selbst führen wir in Kugelkoordinaten durch. Sie ist jedoch erheblich schwieriger als die Berechnung der entsprechenden Übergangsraten für die ρA^2-Kopplung. Das Matrixelement und der Energienenner sorgen nämlich

dafür, daß nun zwei Vorzugsrichtungen $\vec{q}=\vec{q}_1-\vec{q}_2$ und $\vec{q}_2$ im Problem definiert sind (siehe Abbildung 33). Damit ist die Zylindersymmetrie des Integranden (6.9) gebrochen, die ϕ-Integration ist nichttrivial.

Zur Berechnung der Übergangsrate reicht es offentsichtlich die Größe

$$I = \left|\vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)}\right|^2 \int d^3k \, \frac{\cos^2\left(\vec{k}-\vec{q}_2, \vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)}\right)}{\left(\Delta E - k^2 + \alpha\left(\vec{k}-\vec{q}_2\right)^2\right)^2} \left\{ f(\vec{k}+\vec{q}) - f(\vec{k}) \right\} \delta\left((\vec{k}+\vec{q})^2 - k^2 - E\right)$$

zu berechnen. Dabei sind

$$\Delta E = q_2 - E_g - \Delta$$

$$\alpha = \frac{m_c}{m_{so}}$$

$$\left|\vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)}\right|^2 \cos^2\left(\vec{k}-\vec{q}_2, \vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)}\right) = \frac{\left\{\left(\vec{k}-\vec{q}_2\right)\cdot\left(\vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)}\right)\right\}^2}{\left(k-q_2\right)^2} \qquad (6.11)$$

und wie in Abschnitt 5 $E=|\vec{q}_1|-|\vec{q}_2|$ und $\vec{q}=\vec{q}_1-\vec{q}_2$. Wir orientieren die z-Achse unseres Koordinatensystems parallel zu $\vec{q}$, so daß die Fermiverteilungsfunktionen unabhängig von der Winkelvariablen ϕ sind.
Die Integration über die Winkelvariable θ ($z=\cos\theta$) kann unter Ausnutzung der energieerhaltenden Deltafunktion sofort ausgeführt werden.

$$\left(\vec{k}+\vec{q}\right)^2 - k^2 - E = 0$$

$$\Rightarrow \quad z_0 = \frac{E-q^2}{2kq} = \frac{q_0}{k} \qquad (6.12)$$

Es ergibt sich dann weiter (siehe Abbildung 33)

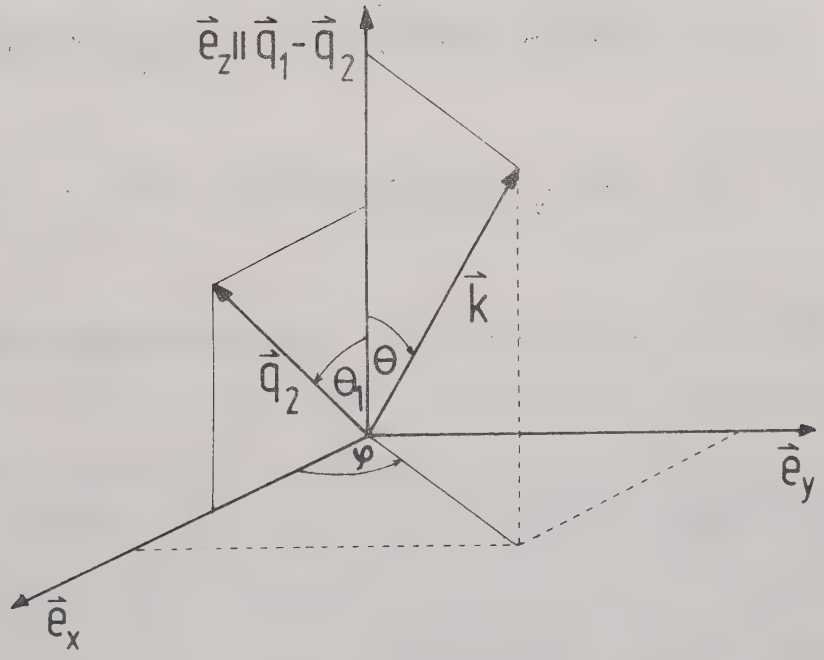


Abbildung 33.

$$\vec{k}\cdot\vec{q}_2\Big|_{z_0} = k\begin{pmatrix}\sin\theta\cos\varphi\\ \sin\theta\sin\varphi\\ \cos\theta\end{pmatrix} q_2 \begin{pmatrix}\sin\theta_1\\ 0\\ \cos\theta_1\end{pmatrix}\Bigg|_{z_0}$$

$$= k q_2 \left\{ \sin\theta \sin\theta_1 \cos\varphi + \cos\theta \cos\theta_1 \right\}_{z_0}$$

$$= q_2 \sqrt{k^2 - q_0^2} \sin\theta_1 \cos\varphi + q_0 q_2 \cos\theta_1$$

$$= \frac{\gamma}{2} \cos\varphi + q_0 q_2 \cos\theta_1 \qquad (6.13)$$

Wir eliminieren von nun an k= k zugunsten der neuen Variablen

$$y = k^2 - q_0^2 \quad , \qquad (6.14)$$

d.h. $\gamma = 2 q_2 \sin\theta_1 \sqrt{y} \geqslant 0$ (6.15)

Die Ungleichung (6.15) gilt, da $0 \leq \theta_1 \leq \pi$ ist (siehe Abbildung 33). Damit wird

$$(\vec{k} - \vec{q}_2)^2 = C - \gamma \cos\varphi \geqslant 0 \qquad (6.16)$$

mit $C = k^2 + q_2^2 - 2 q_0 q_2 \cos\theta_1$

$$= y + C \geqslant 0 \qquad (6.16a)$$

und schließlich

$$\Delta E - k^2 + \alpha(\vec{k}-\vec{q}_2)^2 = \alpha(b - \gamma\cos\varphi) \geq 0 \qquad (6.17)$$

mit

$$b = \{\Delta E - k^2(1-\alpha) + \alpha q_2^2 - 2\alpha q_0 q_2 \cos\theta_1\}/\alpha$$

$$= \left(\frac{1-\alpha}{\alpha}\right)\{B - y\} \geq 0 \qquad (6.17a)$$

und

$$B = (\Delta E - q_0^2(1-\alpha) + \alpha q_2^2 - 2\alpha q_0 q_2 \cos\theta_1)/(1-\alpha) \qquad (6.17b)$$

Zur Begründung der Ungleichung (6.17) werfen wir einen Blick auf das Experiment. In einem Einstrahlexperiment wird der Laserstrahl ω_1 zum Pumpen verwendet, d.h. er wird so eingestellt, daß $\omega_1 - E_g - \Delta - E_f^{(e)} \approx 200\text{meV}$ (siehe Abbildung 34)[26].

Damit ist die Ungleichung (6.17) und auch (6.17a) klar. Mit

---

[26] Da der Abriß des Streuspektrums bei $\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2 \approx 30\text{meV}$ liegt, gilt natürlich auch $\omega_2 - E_g - \Delta - E_f^{(e)} > 100\text{meV}$.

$$\Delta f(y) = \left[f(\vec{k}+\vec{q}) - f(\vec{k}) \right]_{z_0}$$

$$= f\left(\sqrt{y + (q_0+q_2)^2}\right) - f\left(\sqrt{y+q_0^2}\right) \qquad (6.18)$$

finden wir schließlich folgendes Ergebnis.

$$I = \frac{1}{4q\alpha^2} \int_0^\infty dy \int_0^{2\pi} d\varphi \, \frac{\left[(\vec{k}-\vec{q}_2)\cdot(\vec{e}^{(1)}\times\vec{e}^{(2)})\right]_{z_0}^2}{(c-\gamma\cos\varphi)(b-\gamma\cos\varphi)^2} \, \Delta f(y) \qquad (6.19)$$

wobei wir benutzt haben, daß

$$\Theta(1-z_0) = \Theta(k^2-q_0^2) = \Theta(y)$$

Abbildung 34.

Das Integral (6.19) kann man erst ausführen, wenn man Annahmen über die Polarisationen $e^{(1)}$ und $e^{(2)}$ gemacht hat. Für die experimentell interessanten Situationen kann man die Integration über den Winkel ϕ unter Ausnutzung des Residuensatzes ausführen. Wir substituieren dazu

$$z = e^{i\varphi} \longrightarrow d\varphi = \frac{dz}{iz}$$

wobei dann

$$\cos\varphi = \frac{1}{2z}\left[z^2+1\right]$$

$$\sin\varphi = \frac{1}{2iz}\left[z^2-1\right]$$

gilt. Das Intgral

$$\int_0^{2\pi} d\varphi\, f(\varphi) = \frac{1}{i}\oint \frac{dz}{z}\, f(\varphi(z)) \propto \frac{-1}{i}\oint dz\, \frac{8z^2\left[(\vec{k}-\vec{q}_2)\cdot(\vec{e}^{(1)}\times\vec{e}^{(2)})\right]^2_{z_0}}{(z^2-2b'z+1)^2(z^2-2c'z+1)} \qquad (6.20)$$

wird dadurch in ein Wegintegral im Komplexen umgewandelt. Der Weg führt am Rand des Einheitskreises ($|z|=1$) entlang. Wir erhalten zwei Pole 2.Ordnung □

$$z_{1/3} = b' \pm \sqrt{b'^2-1}$$

und zwei Pole 1.Ordnung o[27]

$$z_{2/4} = c' \pm \sqrt{c'^2 - 1} \qquad (6.21)$$

Zur Diskussion der Polstruktur sind die beiden Abschätzungen $c'=c/\gamma \geq 1$ und $b'=b/\gamma \geq 1$, die in (6.16) und (6.17) gegeben worden sind, von zentraler Bedeutung. Da für $a \geq 1$ aber auch $a-1 \leq \sqrt{a^2-1} \leq a$ gilt, gibt es innerhalb des Einheitskreises (siehe Abbildung 35) einen doppelten Pol

$$z_1 = b' - \sqrt{b'^2 - 1}$$

und einen einfachen Pol

$$z_2 = c' - \sqrt{c'^2 - 1} \qquad (6.21a)$$

---

[27] Es zeigt sich, daß in den Kapiteln 6.2 und 6.3 keine weiteren Pole mehr dazukommen.

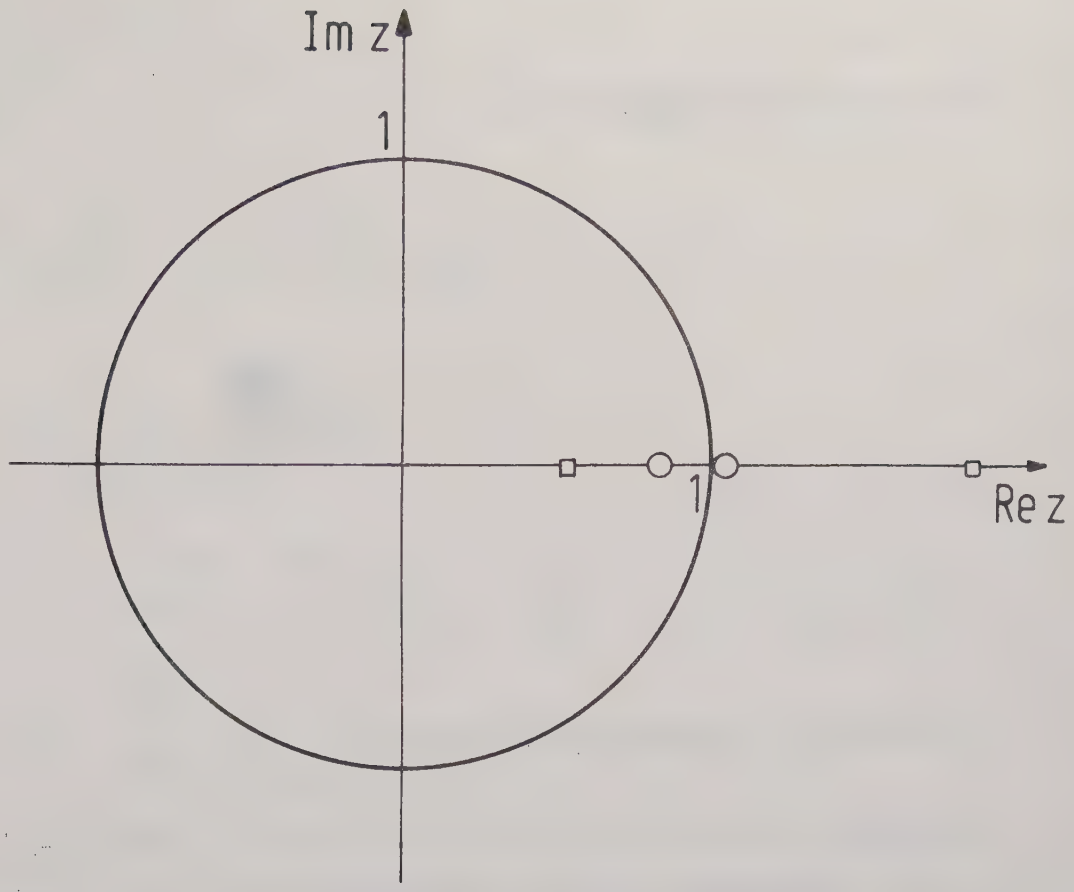


Abbildung 35. Polstruktur

6.1 RÜCKWÄRTSSTREUUNG

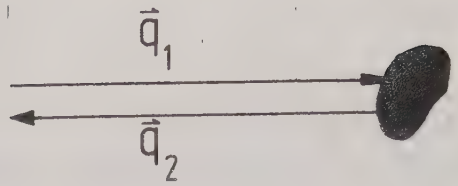


Abbildung 36. Experimentelle Situation

In Rückwärtsstreuung gilt für den Winkel zwischen $\vec{q}_2$ und $\vec{q}=\vec{q}_2-\vec{q}_1$: $\theta_1=\pi$. Da für transversale Anregungen die Polarisationsrichtung senkrecht auf der Ausbreitungsrichtung der Anregung steht, muß also auch

$$\vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)} = \sin(\vec{e}^{(1)}, \vec{e}^{(2)})\, \vec{e}_z$$

gelten. Mit (6.15),(6.16) und (6.17) finden wir

$$\gamma = 0$$

$$C = (q_0 + q_2)^2$$

$$B = \left(\Delta E - q_0^2 + \alpha (q_0 + q_2)^2\right) / (1-\alpha)$$

$$\left[(\vec{k}-\vec{q}_2)\cdot(\vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)})\right]^2_{z_0} = \sin^2(\vec{e}^{(1)}, \vec{e}^{(2)})\,(q_0+q_2)^2 \qquad (6.22)$$

Wir setzen diese Ergebnisse in Gleichung (6.19) ein. Die Winkelintegration ist in diesem Fall trivial, so daß wir folgendes Ergebnis erhalten.

$$I_R = A_R \int_0^\infty dy \; \frac{\Delta f(y)}{(y+C)(y-B)^2}$$

mit

$$A_R = \frac{2\pi (q_0+q_2)^2 \sin^2(\vec{e}^{(1)}, \vec{e}^{(2)})}{4(1-\alpha)^2 q} \qquad (6.23)$$

Da das chemische Potential der Elektronen fast gleich der Fermienergie $E_f^{(e)}$ ist, ist es sinnvoll den entarteten Grenzfall (T=0) zu betrachten.

$$I_R = A_R \int_0^{k_F^2-q_0^2} dy \; \frac{1}{(y+C)(y-B)^2}$$

$$= A_R \left\{ \frac{1}{(B+C)^2} \ln\left|\frac{C+y}{B-y}\right| + \frac{1}{(B+C)(B-y)} \right\}_0^{k_F^2-q_0^2} \qquad (6.24)$$

Fernab der Resonanz, d.h. für

$$B \approx \frac{q_1 - E_g - \Delta}{1-\alpha} \gg k_F^2 - q_0^2$$

finden wir

$$I_R \approx \frac{\hbar}{2} \frac{(q_0+q_2)^2 \sin^2(\vec{e}^{(1)}, \vec{e}^{(2)})}{q(q_1 - E_g - \Delta)^2 (1-\alpha)^2} \ln\left|\frac{k_F^2 - q_0^2 + (q_0+q_2)^2}{(q_0+q_2)^2}\right| \qquad (6.25)$$

Die Übergangsrate

$$I_R \propto \frac{1}{(\Delta E)^2} \propto \frac{1}{(\hbar\omega_1 - E_g - \Delta)^2}$$

fällt mit wachsender Verstimmung des Pumplasers gegenüber der Bandlücke $E_g+\Delta$ rasch ab. In der Nähe der Resonanz beginnen die Details der Bandfüllung eine wichtige Rolle zu spielen. Mit wachsender Dichte wächst die Fermienergie an, sodaß auf diese Weise die Resonanzverstimmung verkleinert wird.

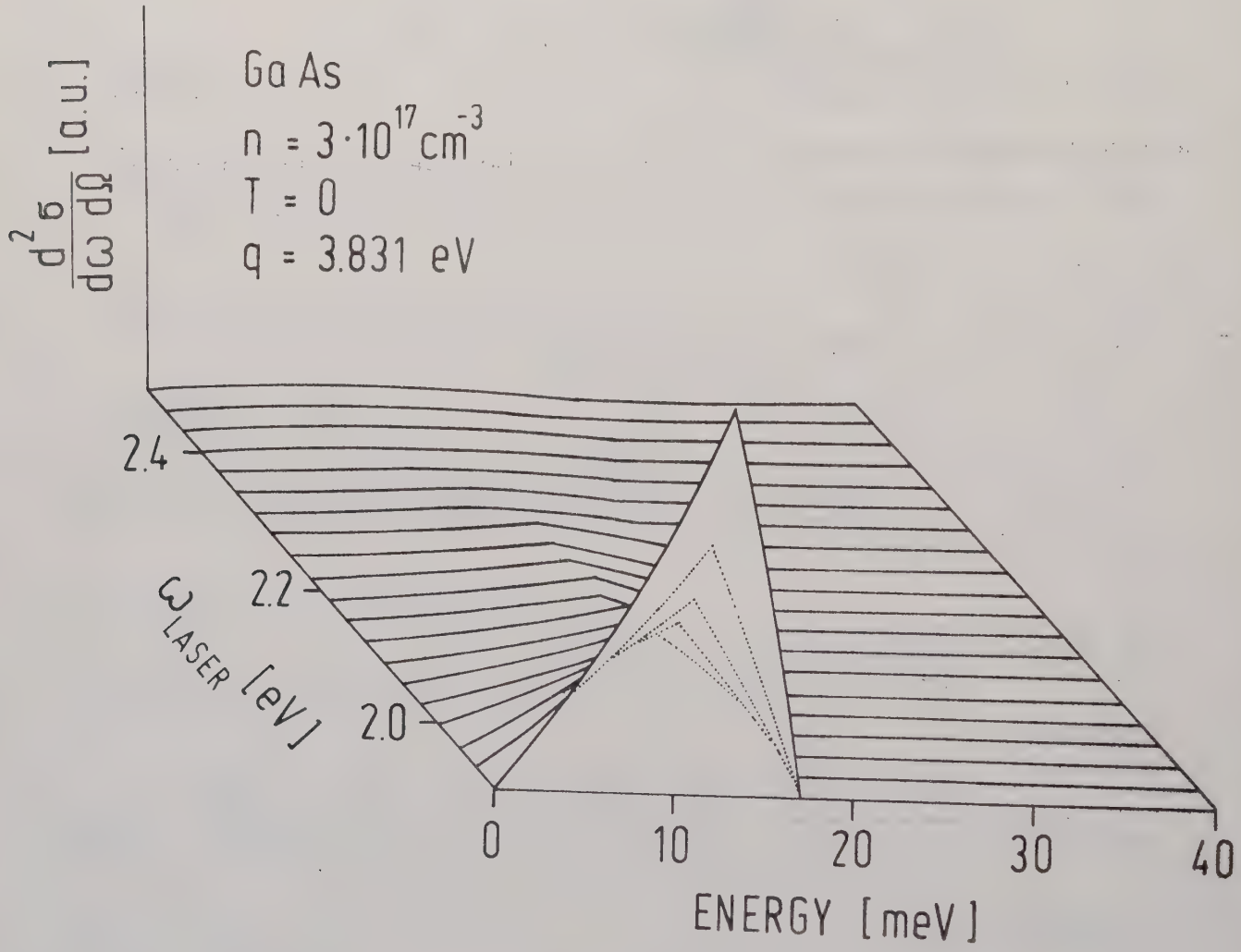


Abbildung 37. Rückwärtsstreuung

In Abbildung 37 sind Ergebnisse für GaAs ($n=3*10^{17}cm^{-3}$, T=0) dargestellt. Mit wachsender Laserfrequenz wächst die Verstimmung. Die Übergangsrate nimmt rasch ab.

6.2 ORTHOGONALE POLARISATION

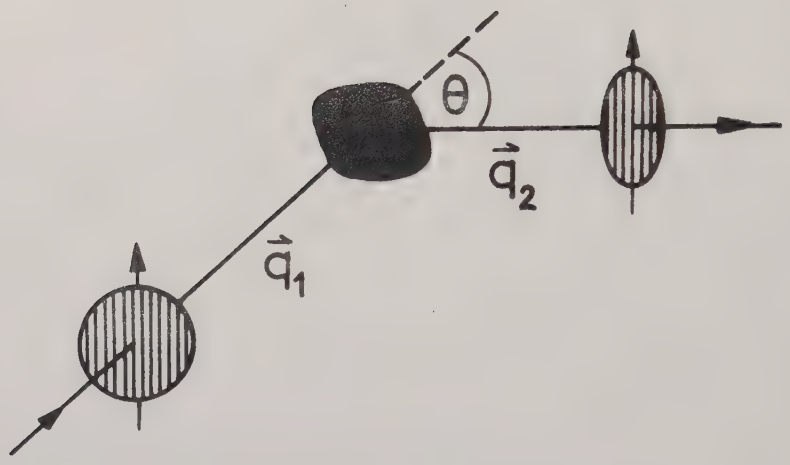


Abbildung 38. Experimentelle Situation

Unter orthogonaler Polarisation ist das in Abbildung 38 gezeigte Experiment zu verstehen. Es wird nur derjenige Teil des gestreuten Lichtes gemessen, dessen Polarisationsrichtung $\vec{e}^{(2)}$ (auf die gezeigte Art) senkrecht zur Polarisationsrichtung $\vec{e}^{(1)}$ des einfallenden Lichtes $\vec{q}_1$ ist, so daß

$$\vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)} = \frac{\vec{q}_2}{q_2} \qquad (6.26)$$

Wir finden dann

$$\left[(\vec{k}-\vec{q}_2)\cdot(\vec{e}^{(1)}\times\vec{e}^{(2)})\right]^2_{z_0} = \frac{1}{4q^2}\left[a-\gamma\cos\varphi\right]^2$$

mit

$$a = a'\gamma = 2q_2^2 - 2q_0 q_2 \cos\Theta_1 \qquad (6.27)$$

Im Hinblick auf (6.19) berechnen wir zunächst das Integral

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \, \frac{[a'-\cos\varphi]^2}{[b'-\cos\varphi]^2[c'-\cos\varphi]} = \frac{-2}{i}\oint dz \, \frac{[z^2-2a'z+1]^2}{[z^2-2b'z+1]^2[z^2-2c'z+1]}$$

$$= -4\pi \sum_{|z|<1} \mathrm{Res} \qquad (6.28)$$

Wir hatten die Polstruktur bereits diskutiert (6.21) und gesehen, daß es einen einfachen Pol z_2 und einen Pol 2.Ordnung z_1 im Einheitskreis gibt. Die Berechnung der zugehörigen Residuen

$$\mathrm{Res}_0 = \left.\frac{(z^2-2a'z+1)^2}{(z-c'-\sqrt{c'^2-1})(z^2-2b'z+1)^2}\right|_{z=c'-\sqrt{c'^2-1}}$$

$$= -\frac{c'-a'}{2(b'-c')^2\sqrt{c'^2-1}} \qquad (6.28a)$$

und

$$\mathrm{Res}_1 = \left.\frac{d}{dz}\left[\frac{(z^2-2a'z+1)^2}{(z-b'-\sqrt{b'^2-1})^2(z^2-2c'z+1)}\right]\right|_{z=b'-\sqrt{b'^2-1}}$$

$$= \frac{b'-a'}{2(b'-c')^2\sqrt{b'^2-1}}\left\{b'(b'-a')(b'-c')-(b'^2-1)(b'-2c'-a')\right\} \qquad (6.28b)$$

ist elementar, wenn auch etwas mühselig. Wir setzen die Ergebnisse (6.27) und (6.28) in die Gleichung (6.19) ein und finden

$$I_0 = \frac{\pi}{8 q q_2^2 \alpha^2} \int_0^\infty dy \, \frac{\Delta f(y)}{(b-c)^2} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \frac{(c-a)^2}{\sqrt{c^2-\gamma^2}} - \frac{b-a}{\left(\sqrt{b^2-\gamma^2}\right)^3} \left[b(b-a)(b-c) - (b^2-1)(b-2c-a) \right] \right\} \quad (6.2$$

(Die Grössen a und b sind in (6.16) und (6.17) definiert). Diesen Ausdruck kann man im allgemeinen nur noch numerisch berechnen. Ferab der Resonanz - $b \approx \Delta E/(1-\alpha) \gg c, a, \gamma$ - spielen die Details der Bandfüllung keine Rolle. Der Ausdruck (6.29) vereinfacht sich deshalb zu

$$I_0 \approx \frac{\pi}{8 q q_2^2 \alpha^2} \int_0^\infty dy \, \frac{\Delta f(y)}{b^2} \left\{ \frac{(c-a)^2}{\sqrt{c^2-\gamma^2}} + 2a - c \right\} \qquad (6.29a)$$

Dieses Integral läßt sich im entarteten Grenzfall (T=0) berechnen. Wir machen dabei wieder von der Tatsache Gebrauch, daß $c' \geq 1$ gilt und führen in dem Ausdruck

$$\sigma = \sqrt{c^2-\gamma^2} = \sqrt{z^2+\eta^2}$$

eine quadratische Ergänzung durch, d.h.

$$z = y + C - 2 q_2^2 \sin^2 \Theta_1$$

und mit

$$\eta = 2 q_2 \sin \Theta_1 \left\{ q_0 - q_2 \cos \Theta_1 \right\}$$

$$\chi = 2q_2^2 \cos^2\theta_1 + 2q_0 q_2 \cos\theta_1$$

$$\Gamma = 2q_2^2 \sin^2\theta_1 - 2\chi \qquad (6.30a)$$

ergibt sich dann das Integral $(T=0)$

$$I_0 = \frac{\hbar}{8 q q_2^2 (1-\alpha)^2 \Delta E^2} \int_{z(0)}^{z(k_F^2-q_0^2)} dz \left\{ \Gamma - z + \frac{(z-\chi)^2}{\sigma} \right\} \qquad (6.30)$$

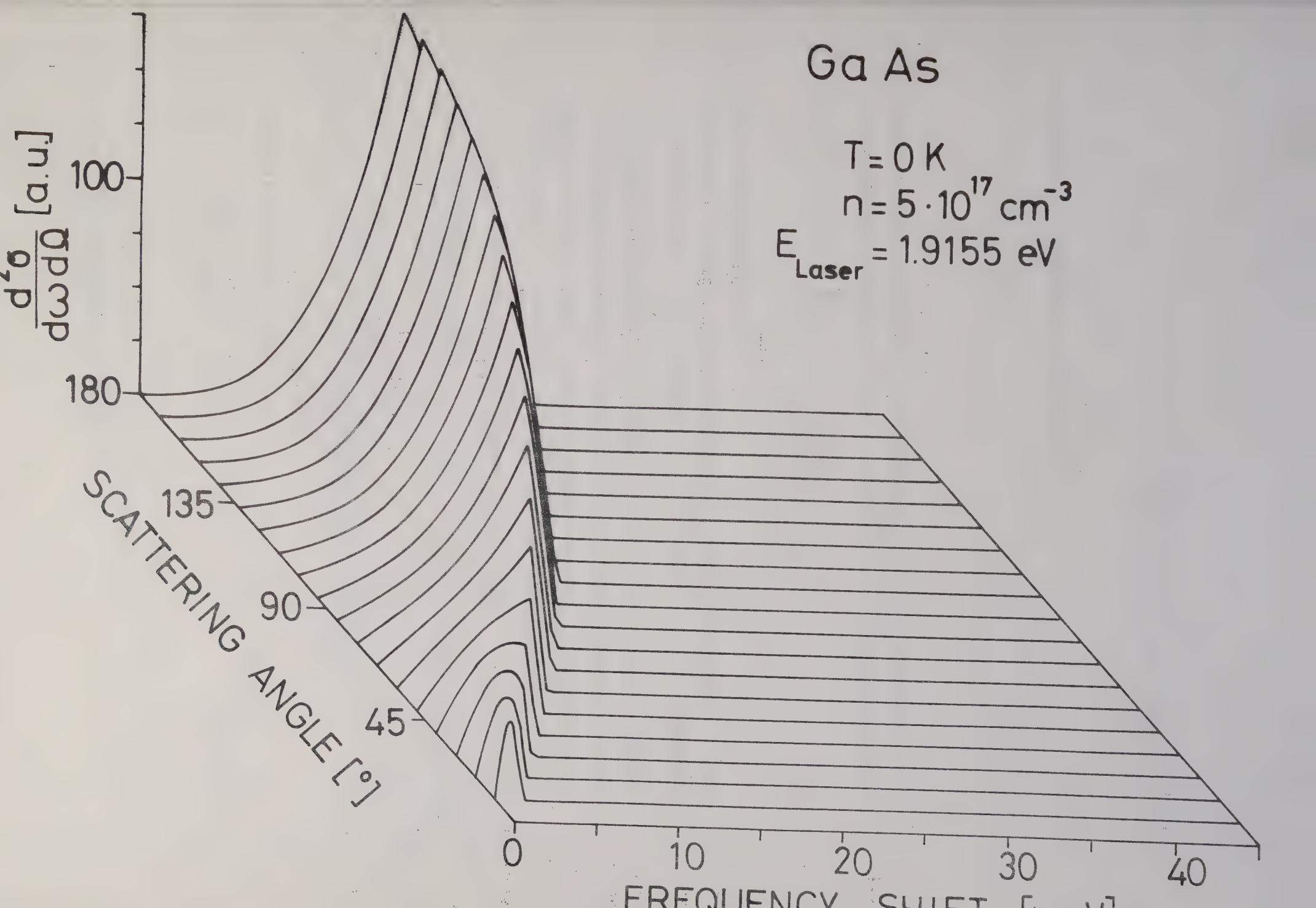
$$= \frac{\hbar}{8 q q_2^2 (1-\alpha)^2 \Delta E^2} \left[\Gamma z - \frac{z^2}{2} - \left(2\chi - \frac{z}{2}\right)\sigma + \left(\chi^2 - \frac{\chi^2}{2}\right) \ln|z+\sigma| \right]_{z(0)}^{z(k_F^2-q_0^2)}$$

Für den Grenzfall der Rückwärtsstreuung - $\theta_1=\pi$ - gewinnen wir das Ergebnis (6.25) zurück. In Abbildung 39 sind Ergebnisse für GaAs ($n=5*10^{17}cm^{-3}$, T=0) dargestellt. Dabei wird der Streuwinkel von 0 - Vorwärtsstreuung - bis π - Rückwärtsstreuung - durchgefahren und die Übergangsrate gegen den Energieübertrag $\Delta\omega=\omega_1-\omega_2$ aufgetragen. Es zeigt sich, daß die Effizienz der Streuung und die Abrißenergie - $E_{max}=2k_f q+q^2$ - mit wachsendem Streuwinkel zunehmen. Die Zunahme der Abrißenergie ist leicht zu verstehen, da der Impulsübertrag

$$q = |\vec{q}_1 - \vec{q}_2| = \sqrt{q_1^2 + q_2^2 - 2q_1 q_2 \cos^2\theta}$$

mit wachsendem Streuwinkel zunimmt. Experimente, in denen diese Abhängigkeiten untersucht werden, sind bislang nicht durchgeführt worden.

Abbildung 39. Orthogonale Polarisation


Ga As
T = 0 K
n = 5 · 10^17 cm^-3
E_Laser = 1.9155 eV
d²σ / dω dΩ [a.u.]
100
180
SCATTERING ANGLE [°]
135
90
45
0
10
20
30
40
FREQUENCY SHIFT [meV]

6.3 KOMPLANARE POLARISATION

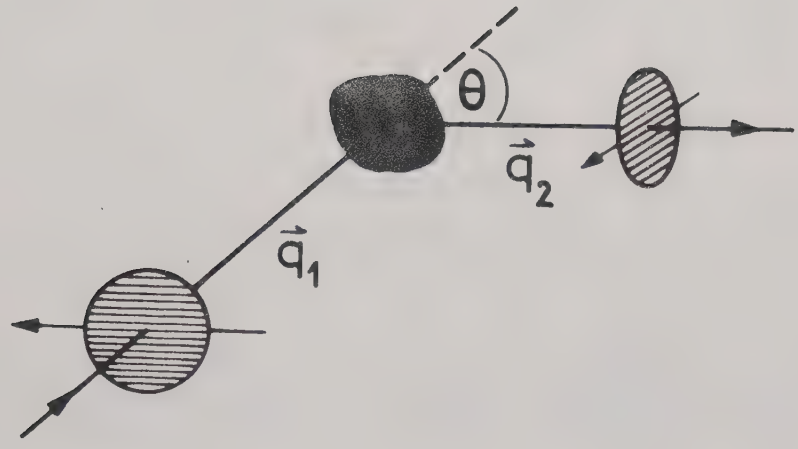


Abbildung 40. Experimentelle Situation

Unter komplanarer Polarisation wollen wir das folgende Experiment verstehen. Der Polarisationsvektor $\vec{e}^{(1)}$ des eingestrahlten Lichtfeldes liegt in der Ebene, die durch $\vec{q}_1$ und $\vec{q}_2$ definiert wird. Am Detektor wird auch nur derjenige Anteil des Streulichts beobachtet, dessen Polarisationsvektor $\vec{e}^{(2)}$ in dieser Ebene liegt (siehe Abbildung 40). Das Kreuzprodukt der bei-

den Polarisationsvektoren steht dann senkrecht auf der $\vec{q}_1, \vec{q}_2$-Ebene, sodaß wir

$$\vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)} = \sin(\vec{q}_1, \vec{q}_2)\, \vec{e}_y$$

erhalten (siehe Abbildung 33 auf Seite 115). Damit finden wir dann

$$\left[(\vec{k} - \vec{q}_2)\cdot(\vec{e}^{(1)} \times \vec{e}^{(2)})\right]^2_{z_0} = \left[k\sqrt{1-z_0^2}\,\sin\varphi\,\sin(\vec{q}_1, \vec{q}_2)\right]^2$$

$$= y\,\sin^2\varphi\,\sin^2(\vec{q}_1, \vec{q}_2) \qquad (6.31)$$

Im Hinblick auf (6.19) werten wir zunächst wieder das Integral

$$\int_0^{2\pi} d\varphi\, \frac{\sin^2\varphi}{[b' - \cos\varphi]^2 [c' - \cos\varphi]} = \frac{-2}{i} \oint dz\, \frac{[z^2-1]^2}{[z^2 - 2b'z + 1]^2 [z^2 - 2c'z + 1]}$$

$$= -4\pi \sum_{|z|<1} \mathrm{Res} \qquad (6.32)$$

aus. Innerhalb des Einheitskreises gibt es (siehe (6.21)) einen einfachen und einen doppelten Pol für dieses Integral. Für die zugehörigen Residuen ergibt sich

$$\mathrm{Res}_0 = \left.\frac{(z^2-1)^2}{(z - c' - \sqrt{c'^2-1})(z^2 - 2b'z + 1)^2}\right|_{z = c' - \sqrt{c'^2-1}}$$

$$= -\frac{\sqrt{c'^2-1}}{2(b'-c')^2} \qquad (6.32a)$$

und

$$\mathrm{Res}_1 = \frac{d}{dz}\left[\frac{(z^2-1)^2}{(z-b'-\sqrt{b'^2-1})^2(z^2-2c'z+1)}\right]\Bigg|_{z=b'-\sqrt{b'^2-1}}$$

$$= \frac{b'c'-1}{2(b'-c')^2\sqrt{b'^2-1}} \qquad (6.32b)$$

Wir setzen die Ergebnisse (6.31) und (6.32) in die Gleichung (6.19) ein und gewinnen folgenden Ausdruck

$$I_k = \frac{\pi \sin^2(\vec{q}_1,\vec{q}_2)}{2\alpha^2 q}\int_0^\infty dy\,\frac{y}{\gamma^2}(b-c)^2\left\{\frac{bc-\gamma^2}{\sqrt{b^2-\gamma^2}} - \sqrt{c^2-\gamma^2}\right\} \qquad (6.33)$$

Wir sehen, daß das Integral I_k und damit auch die Übergangsrate in Vorwärtsstreuung $\measuredangle(\vec{q}_1,\vec{q}_2)=0$ und in Rückwärtsstreuung $\measuredangle(\vec{q}_1,\vec{q}_2)=\pi$ verschwinden. Das hat seinen Grund in der Tatsache, daß die Polarisationsvektoren $\vec{e}^{(1)}$ und $\vec{e}^{(2)}$ dann parallel sind. Fernab der Resonanz - $b\approx\Delta E/(1-\alpha)\gg c,\gamma$ - finden wir im entarteten Grenzfall wieder eine analytische Lösung

$$I_k \approx \frac{\pi \sin^2(\vec{q}_1,\vec{q}_2)}{4q(1-\alpha)^2\Delta E^2\tau}\int_0^{k_F^2-q_0^2} dy\,\left\{y + C - \sqrt{(y+C)^2-2y\tau}\right\}$$

wobei

$$\tau = 2q_2^2\sin^2\theta_1$$

ist. Wir führen eine quadratische Ergänzung wie in (6.30) durch und finden

$$I_k \approx \frac{\pi \sin^2(\vec{q}_1,\vec{q}_2)}{4q(1-\alpha)^2\Delta E^2\tau}\left[\frac{z^2}{2} + \tau z - \frac{z}{2}\sigma - \frac{\tau^2}{2}\ln|z+\sigma|\right]_{z(0)}^{z(k_F^2-q_0^2)} \qquad (6.34)$$

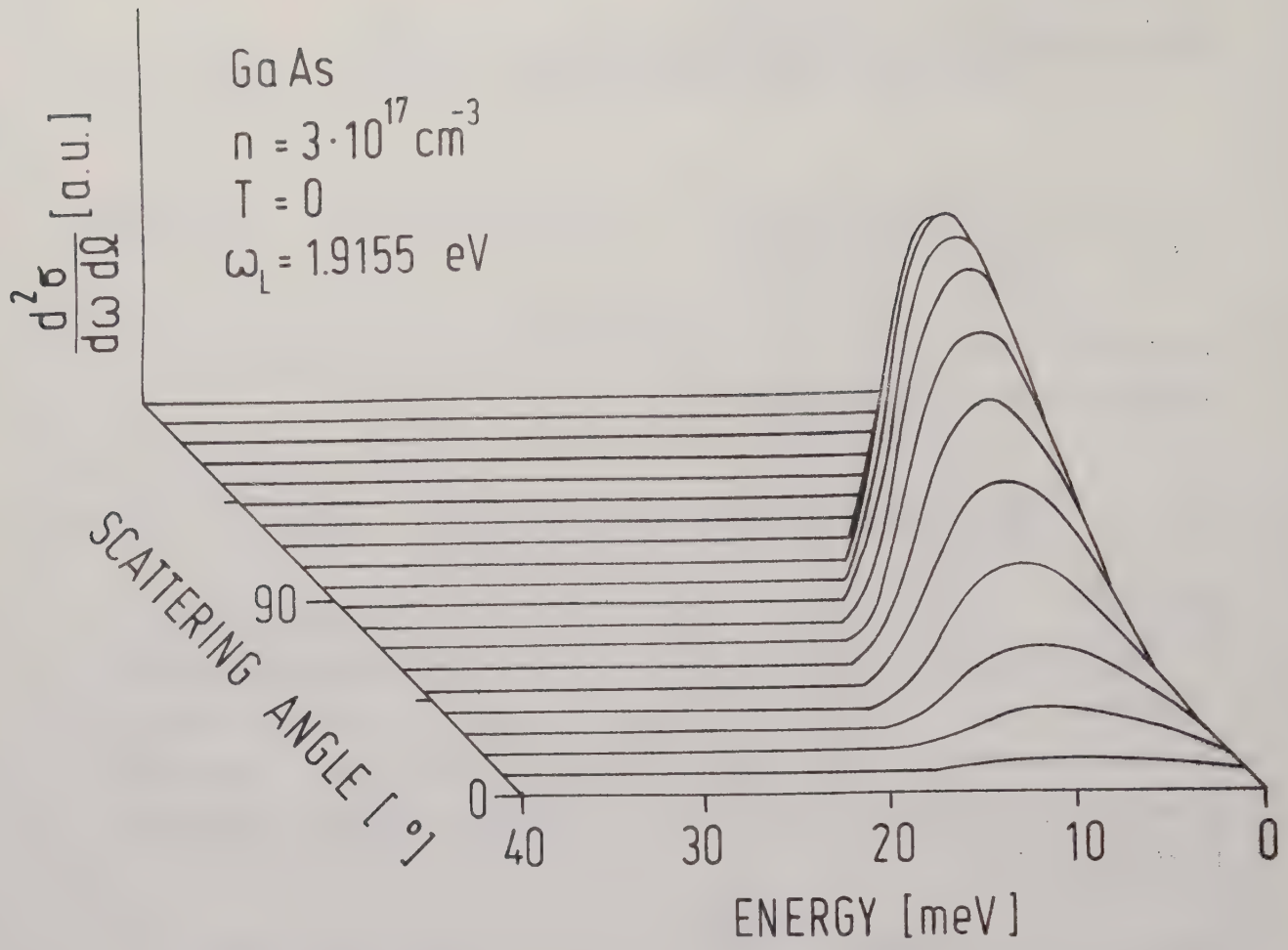


Abbildung 41. Komplanare Polarisation

In Abbildung 41 sind Ergebnisse für GaAs ($n=5*10^{17}cm^{-3}$, T=0) dargestellt. Wie in Kapitel 6.2 zeigt sich das Verschieben der Abrißenergie E_{max} mit dem Streuwinkel. In Vorwärts- und Rückwärtsstreuung verschwindet die Übergangsrate, da die Polarisationsvektoren parallel sind. Experimentelle Ergebnisse liegen für diese Versuchsanordnung noch nicht vor. Der Reiz einer solchen Anordnung besteht in der Möglichkeit ρA^2- und $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung nebeneinander zu betrachten, da die Polarisationsvektoren hier nicht wie in Kapitel 6.2 immer orthogonal sind.

Im letzten Abschnitt dieser Arbeit werden wir noch einige Vergleiche zwischen Theorie und Experiment anstellen. Dazu wollen wir uns zunächst noch einmal die experimentelle Situation ins Gedächtnis zurückrufen.

Abbildung 42. Experimentelle Situation

Zur Präparation des Experiments wählt man die Frequenz ω_1 des eingestrahlten Lichtes und dessen Polarisation $\vec{e}_1$. Der Streuwinkel θ wird dann durch die Aufstellung des Detektors gegeben. Die Polarisation $\vec{e}_2$ wird durch das Aufstellen eines Polarisationsfilters geregelt. An das System wird beim Ramanexperiment die Energie

$$\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2$$

und der Impuls

$$|\vec{\Delta p}| = \sqrt{p_1^2 + p_2^2 - 2 p_1 p_2 \cos\theta}$$

übergeben. Da das Interesse dieser Arbeit an der Ramanstreuung am Plasma liegt, lohnt es sich, einen Blick auf die Bandstruktur in der Nähe des Γ-Punktes zu werfen.

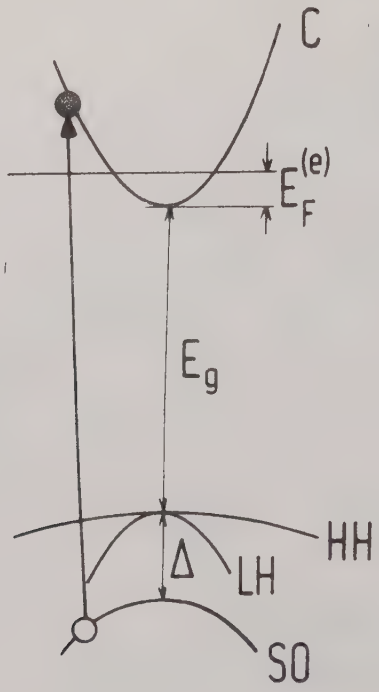


Abbildung 43.

In einem Einstrahlexperiment, das in Abbildung 42 gezeigt wird [28], wird der einfallende Laserstrahl gleichzeitig zum Pumpen des Plasmas verwendet. Wir unterscheiden dabei zwei Typen von Messungen, nämlich resonante Messungen - $\omega_L > E_g$ - und nichtresonante Messungen - $\omega_L < E_g$. Die hier betrachteten Experimente wurden grundsätzlich in Rückwärtsstreuung ($\theta=\pi$) ausgeführt.

---

[28] Zweistrahlexperimente sind bislang noch nicht ausgeführt worden.

A) Nichtresonante Experimente

Wir betrachten zunächst den Abschnitt 6 und erkennen, daß die $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung bei diesen Experimenten eine nur untergeordnete Rolle spielt (siehe Gleichung (6.9)), die Streuung wird durch die ρA^2-Kopplung dominiert. Auch die direkte Absorption (1.Ordnung) ist nicht möglich, da ja die Frequenz des einfallenden Lichtes kleiner als die Bandlücke ist. Der Kristall bleibt transparent. Im Experiment ist ein homogenes Plasma garantiert, da es durch 2-Photonenabsorption erzeugt wird. Diese Technik hat zunächst einmal zwei Folgen. Zum einen erfolgt die Anregung - $2\omega_i \gg E_g + \Delta$ - sehr hoch im Band. Das Plasma hat dadurch eine relativ hohe Temperatur ($T \approx 150K$). Diese Tatsache ist jedoch ohne große Auswirkungen, da das chemische Potential der Elektronen (im Leitungsband) bei diesen Temperaturen noch ganz klar positiv ist (siehe Abbildung 11 auf Seite 64). Zum anderen gelingt es wegen der geringen Effizienz der 2-Photonenabsorption nicht zu hohen Dichten vorzudringen. Die derzeitige Grenze liegt - bedingt durch die verfügbaren Laserleistungen - bei $n \approx 5*10^{16} cm^{-3}$, d.h. der Kreuzungsbereich der beiden Plasmon-Phonon Moden bei $n \approx 2*10^{17} cm^{-3}$ wird nicht erreicht. Abbildung 44 zeigt Vergleiche zwischen der Theorie und Experimenten von Nather [37].

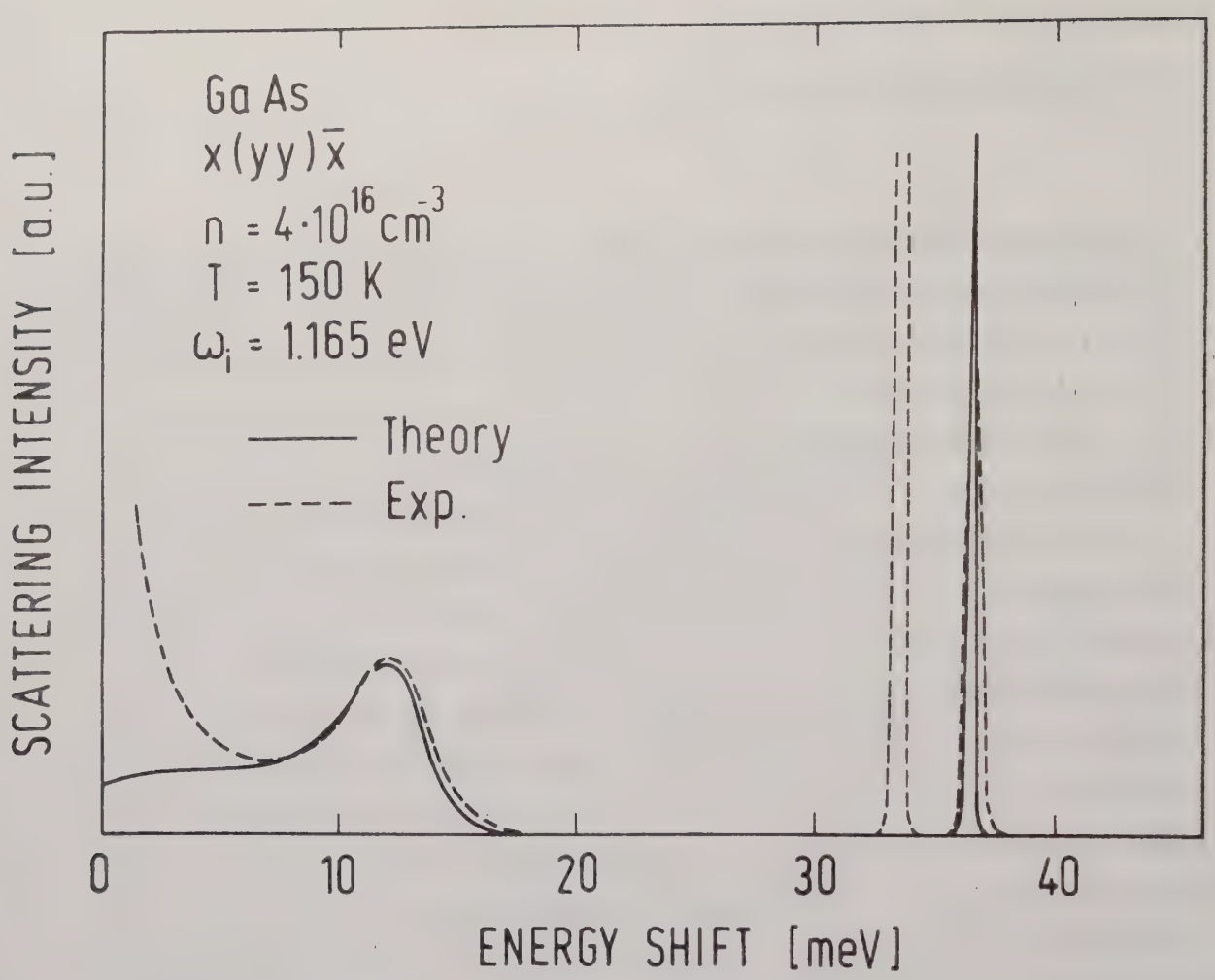


Abbildung 44. Nichtresonante Experimente

Wie man sieht, ist die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment ohne den Einsatz irgendwelcher Anpassparameter sehr gut. Dichte und Temperatur sind nämlich aus Lumineszenzmessungen bekannt, das Ramanexperiment als die präzisere Messung erlaubt es lediglich, die beiden Werte genauer festzulegen. Wir erkennen in Abbildung 44, daß ω_--Mode in den Bereichen ist,in denen die Landau-Dämpfung einsetzt. Durch den geringen Impulsübertrag (ω_L=1.165eV) verläßt die Plasmafrequenz schon bei sehr kleinen Dichten die Bereiche der Intrabandanregungen. Der dämpfende Einfluß der Intervalenzbandstreuung erweist sich als notwendig um die Expe-

rimente zu erklären. Die Plasmon-Phonon Mode ω_+ wird ansonsten so scharf, daß sie sich einer graphischen Darstellung entzieht. Wir sehen aus Abbildung 44, daß die Breite der gerechneten ω_+-Mode zwar etwas geringer als die der gemessenen ist. Wenn man jedoch bedenkt, daß in die Berechnung der Spektren keinerlei phänomenologische Dämpfungen eingegangen sind, kann man die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment als sehr gut bezeichnen. Das TO-Phonon tritt hier aufgrund der Kopplung an die Ionen auf [22], die hier nicht behandelt worden sind. Vom Standpunkt der Theorie ist die Feststellung wichtig, daß bei Dichten von $n \approx 5*10^{16} cm^{-3}$ mit RPA bereits gute Ergebnisse erzielt werden. Als Hochdichteapproximation ist RPA dann auch bei höheren Dichten gültig.

B) Resonante Experimente

In resonanten Experimenten wird die Frequenz des Lasers so eingestellt, daß $\omega_L \approx E_g + \Delta$ ist, die $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung (siehe Abschnitt 6) ist dann natürlich wichtig. Das Pumpen des Plasmas erfolgt hier durch direkte Absorption. Der Kristall wird hierdurch im Spot opaque, so daß das autreffende Laserlicht nicht weiter eindringen kann. Die Folge sind Inhomogenitäten im Plasma. Die Ramanlinien werden hierdurch verbreitert und infolge der Driftbewegung des Plasmas ergibt sich eine Dopplerverschiebung der Plasmon-Phonon Moden ([33]-[35]). Es war das Ziel der Experimentatoren, diese Inhomogenitäten zu beseitigen. Hierzu wurde das Plasma in einer Umgebung mit einer grösseren Bandlücke eingesperrt (confinement). Abbildung 45 zeigt eine Anordnung, wie sie in den Experimenten von Nather verwandt wurde.

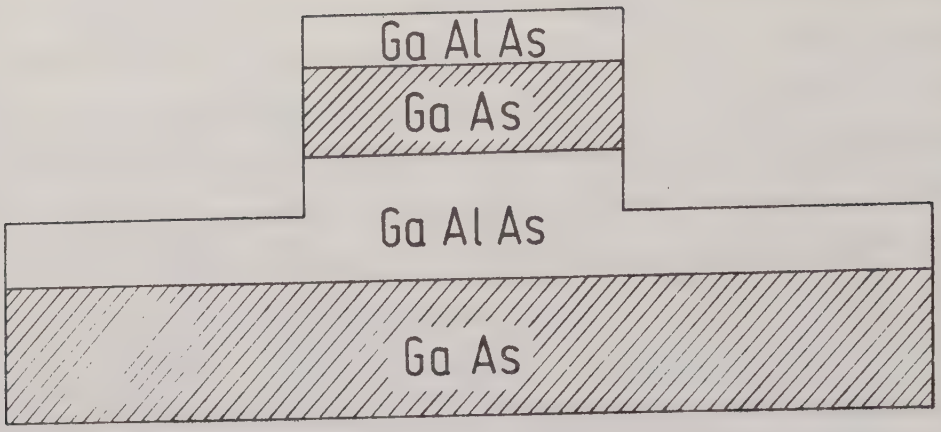


Abbildung 45. Confinement

Abbildung 46 zeigt einen Vergleich zwischen Theorie und Experiment bei orthogonaler Polarisation, Abbildung 47 zeigt einen Vergleich zwischen Theorie und Experiment bei paralleler Polarisation. Die Experimente wurden von Nather [37] durchgeführt. Zum Vergleich zwischen Theorie und Experiment muß aus den experimentellen Daten der Anteil, der aus der $E_g+\Delta$-Lumineszenz (siehe Abbildung 31 auf Seite 109) herrührt, eliminiert werden. Dieser Prozedur, die auch schon von Pinczuk et al. [36] durchgeführt wurde, haftet natürlich eine gewisse Willkür an. Dabei wurde hier davon ausgegangen, daß die Lumineszenz unabhängig von der Polarisation ist. Folglich wurde aus beiden Spektren dasselbe Lumineszenzband abgezogen.

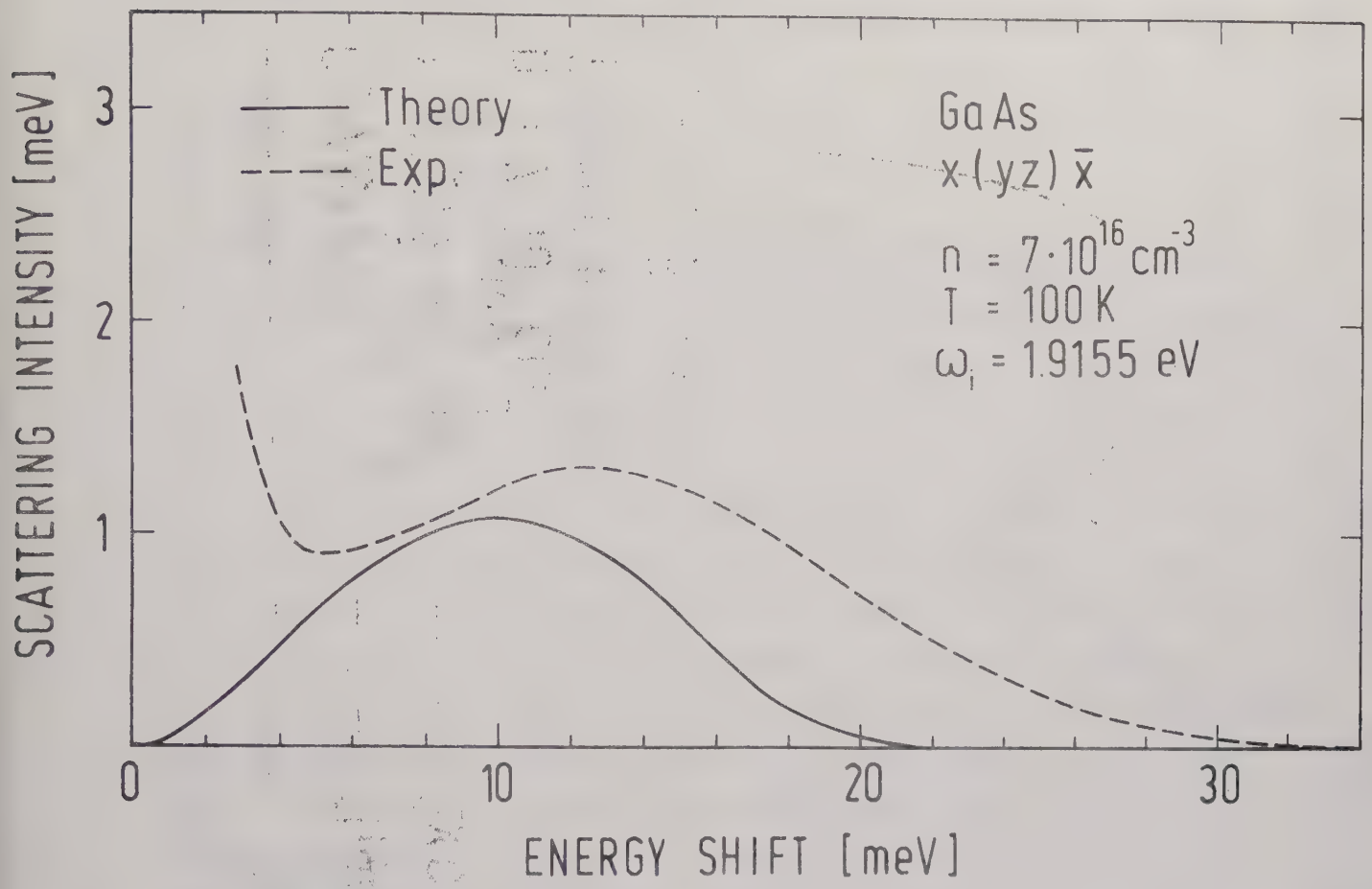
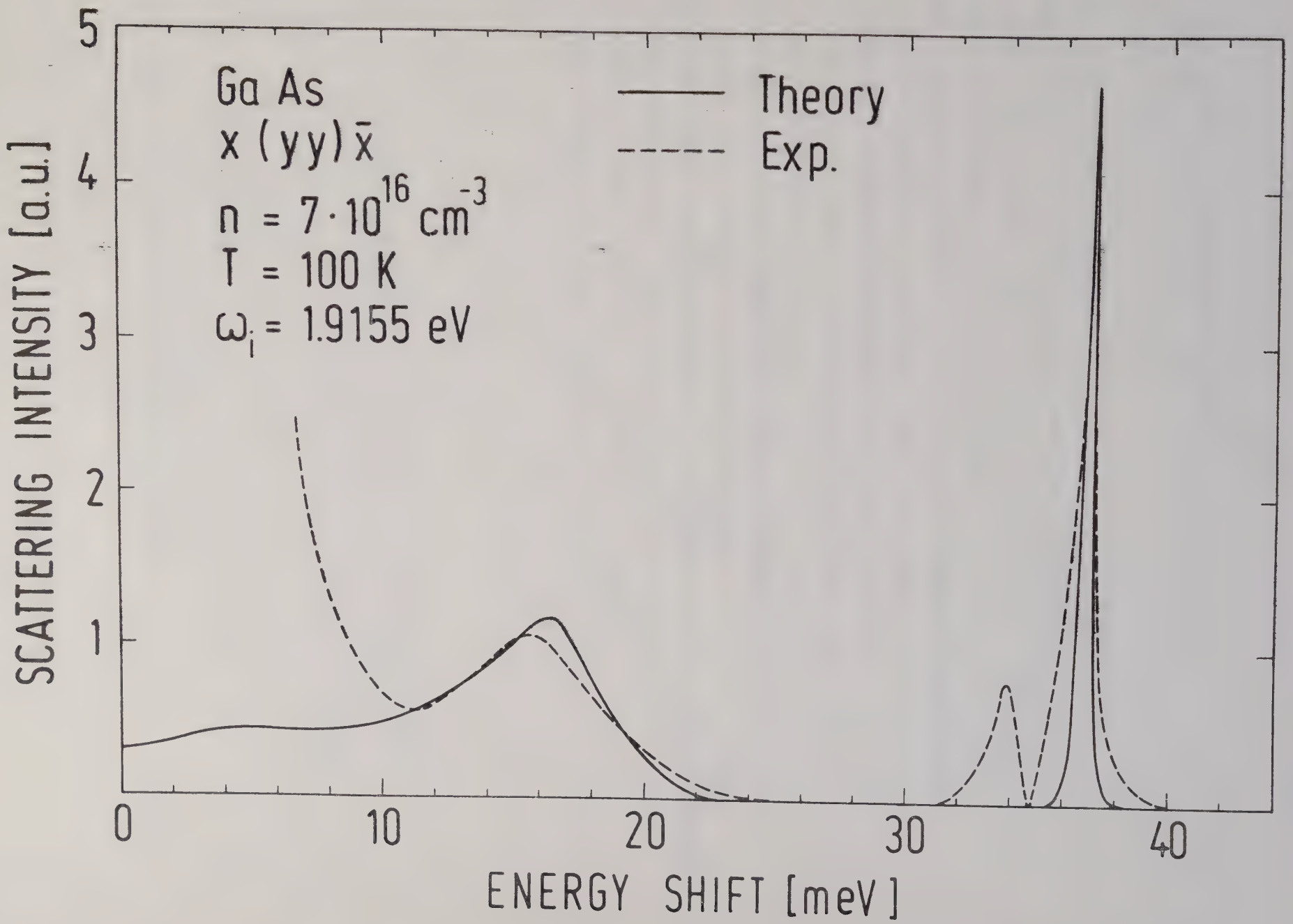


Abbildung 47. Orthogonale Polarisation

Dabei wurden die Übergangsraten in paralleler Polarisation (ρA^2-Kopplung) und in orthogonaler Polarisation ($\vec{j}\vec{A}$-Kopplung) in der Theorie wie im Experiment auf derselben Skala gemessen. Man kann die quantitative Übereinstimmung in beiden Fällen als guten Anhalt dafür werten, daß die in Abschnitt 6 entwickelte Theorie die wesentlichen Effekte erfasst. Bei

---

Abbildung 46. Parallele Polarisation


Ga As
x (yy) x̄
n = 7·10^16 cm^-3
T = 100 K
ω_i = 1.9155 eV
Theory
Exp.
SCATTERING INTENSITY [a.u.]
ENERGY SHIFT [meV]
0
10
20
30
40
1
2
3
4
5

142

$\Delta\omega=0$ ergibt sich in der $\vec{j}\vec{A}$-Kopplung ein Einbruch in der Linienform. Um dieses Verhalten zu verstehen, werfen wir nochmals einen Blick auf die Gleichung

$$\dot{W}_{1\to 2} \propto \frac{1}{e^{-\beta\Delta\omega}-1} \operatorname{Im} G(\Delta q, \Delta\omega)$$

Bei $\Delta\omega=0$ spielt offensichtlich die erste Ableitung von $G(\Delta q,\Delta\omega)$ die entscheidende Rolle für Verhalten der Übergangsrate. Für den hier gezeigten $\vec{j}\vec{A}$-Prozess ist die führende Ordnung quadratisch und somit verschwindet $W_{1\to 2}(\Delta\omega=0)=0$. Andere, unberücksichtigte Einflüße, die für den Gesamtprozeß ohne Bedeutung sind, liefern die linearen Beiträge zu G, die den Einbruch verschwinden lassen. Abschließend kann man feststellen, daß die Experimente durch die Theorie weitgehend erklärt werden können. In paralleler Polarisation kann die Lage der Plasmon-Phonon Moden geliefert werden. Die Lage der ω_--Mode liegt in den numerischen Ergenissen etwas höher als es die Plasmon- Phonon Spektren erwarten lassen, ein Effekt der Landau-Dämpfung. Die Breite der ω_+-Mode wird von der Theorie etwas unterschätzt. Die intrinsischen Dämpfungen reichen jedoch fast aus, um die Linienform zu erklären. In den resonanten Experimenten werden die Linienbreiten stärker unterschätzt als in den nichtresonanten Experimenten. Der Grund hierfür dürfte in den noch nicht ganz beseitigten räumlichen Inhomogenitäten zu finden sein. Für weitergehende Vergleiche wäre es wünschenswert, wenn es gelänge, die Lumineszenzbande systematisch zu eliminieren. Eine Möglichkeit bestünde in Zweistrahlexperimente, in denen mit einem resonanten Strahl gepumpt wird und mit einem nichtresonanten Strahl geprobt wird.

ANHANG

A1. EIGENSCHAFTEN DER RETARDIERTEN GREENSCHEN FUNKTION

Das Interesse dieser Arbeit liegt in Prozessen ohne Teilchenzahlerhaltung. Wir wählen daher die großkanonische Mittelung

$$\langle O(t) \rangle = \frac{1}{Z} \, Sp\left[e^{-\beta \mathcal{H}} \, O(t) \right]$$

$$Z = Sp\left[e^{-\beta \mathcal{H}} \right]$$

$$\mathcal{H} = H - \mu N \qquad (A1.1)$$

Z nennt man die großkanonische Zustandssumme. Die Zeitentwicklung des Operators ($\hbar$=1)

$$O(t) = e^{i\mathcal{H}t} \, O \, e^{-i\mathcal{H}t} \qquad (A1.2)$$

ist im Heisenbergbild gegeben.

---

[29] Dieser Abschnitt lehnt sich in der Argumentation an das Lehrbuch von Zubarev [73] an.

1) DIE KORRELATIONSFUNKTION

Bevor wir nun die retardierte Greensche Funktion einführen vergegenwärtigen wir uns einige einfache Eigenschaften der Korrelationsfunktion $\langle A(t)B(t')\rangle$.

α)

$$\langle A(t)\,B(t')\rangle = \langle A(t-t')\,B(0)\rangle \qquad (A1.3)$$

BEWEIS

$$\langle A(t)\,B(t')\rangle = \frac{1}{Z}\,Sp\left\{e^{-\beta\mathcal{H}}\,e^{i\mathcal{H}t}\,A\,e^{-i\mathcal{H}(t-t')}\,B\,e^{-i\mathcal{H}t'}\right\}$$

$$= \frac{1}{Z}\,Sp\left\{e^{-i\mathcal{H}t'}\,e^{-\beta\mathcal{H}}\,e^{i\mathcal{H}t}\,A\,e^{-i\mathcal{H}(t-t')}\,B\right\}$$

$$= \langle A(t-t')\,B(0)\rangle$$

Aufgrund dieser Eigenschaft können wir nun sinnvoll definieren

$$J_{AB}(t) = \langle A(t)\,B(0)\rangle$$

$$J_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\; e^{i\omega t}\,J_{AB}(t) \qquad (A1.4)$$

β)

$$J_{AB}(\omega)^{*} = \epsilon_A\,\epsilon_B\,J_{AB}(\omega) \qquad (A1.5)$$

wobei ϵ_A die Parität ist, d.h. $A(-t)=\epsilon_A\,A(t)$

BEWEIS

$$\epsilon_A \epsilon_B \mathcal{J}_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t}\, \epsilon_A \epsilon_B \mathcal{J}_{AB}(t)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t}\, \mathcal{J}_{AB}(-t)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-i\omega t}\, \mathcal{J}_{AB}(t)$$

$$= \mathcal{J}_{AB}(\omega)^*$$

Die letzte Gleichung gilt, da $J_{AB}(t)$ reel ist. Für nichtmagnetische Systeme ($\varepsilon_A = \varepsilon_B$) ist also auch die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion reel.

γ) Dissipations-Fluktuations-Theorem

$$\mathcal{J}_{AB}(\omega) = e^{\beta\omega}\, \mathcal{J}_{BA}(-\omega) \qquad \text{(A1.6)}$$

BEWEIS

Für diesen Beweis führen wir eine Entwicklung der Korrelationsfunktionen nach Eigenfunktionen von $\mathcal{H}$ durch.

$$\mathcal{J}_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \mathcal{J}_{AB}(t)\, e^{i\omega t}$$

$$= \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} \sum_{\mu,\nu} \langle \mu | e^{-\beta\mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t} | \nu \rangle \langle \nu | B | \mu \rangle$$

$$\mathcal{J}_{AB}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{\mu,\nu} \delta(\omega + E_\mu - E_\nu)\, e^{-\beta E_\mu} \langle \mu | A | \nu \rangle \langle \nu | B | \mu \rangle$$

$$= \frac{e^{\beta\omega}}{Z} \sum_{\mu,\nu} \delta(\omega + E_\mu - E_\nu)\, e^{-\beta E_\nu} \langle \nu | B | \mu \rangle \langle \mu | A | \nu \rangle$$

$$= \frac{e^{\beta\omega}}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} \sum_{\mu,\nu} \langle \nu | e^{-\beta \mathcal{H}} e^{-i\mathcal{H}t} B e^{i\mathcal{H}t} | \mu \rangle \langle \mu | A | \nu \rangle$$

$$= e^{\beta\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-i\omega t}\, \mathcal{J}_{BA}(t)$$

$$= e^{\beta\omega}\, \mathcal{J}_{BA}(-\omega)$$

2) DIE RETARDIERTE GREENSCHE FUNKTION

Nachdem wir uns nun die wichtigsten Eigenschaften der Korrelationsfunktionen nochmals ins Gedächtnis gerufen haben, führen wir nun die retardierte Greensche Funktion

$$G(t) := -i\, \theta(t) \langle [A(t), B(0)] \rangle \qquad (A1.7)$$

ein. Diese Definition ist wegen (A1.3) auch sinnvoll. Leider besitzt die Greensche Funktion G(t) keine Fouriertransformierte, die Funktion

$$\tilde{G}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \; e^{izt} \; G(t)$$

ist jedoch in der oberen komplexen Halbebene definiert, da

$$\lim_{t \to \infty} e^{izt} = 0$$

gilt. Wir betrachten deshalb die analytische Fortsetzung der Funktion G und definieren

$$G(\omega) := \lim_{\epsilon \to 0} \tilde{G}(\omega + i\epsilon)$$

α) Dispersionrelation

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \; \frac{\left[e^{-\beta\omega'} - 1\right] J_{AB}(\omega')}{\omega' - \omega - i\epsilon} \qquad (A1.9)$$

BEWEIS

Zum Beweis verwenden wir das Dissipations-Fluktuations-Theorem (A1.6).

$$G(\omega) = \frac{-i}{2\pi} \int_{0}^{\infty} dt \; e^{i(\omega+i\epsilon)t} \left\{ J_{AB}(t) - J_{BA}(-t) \right\}$$

$$= \frac{-i}{2\pi} \int_{0}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \; e^{i(\omega-\omega'+i\epsilon)t} \left\{ J_{AB}(\omega') - J_{BA}(-\omega') \right\}$$

$$= \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \; \frac{J_{AB}(\omega') - J_{BA}(-\omega')}{\omega' - \omega - i\epsilon}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \; \frac{\left[e^{-\beta\omega'} - 1\right] J_{AB}(\omega)}{\omega' - \omega - i\epsilon}$$

β) Folgerungen

Wenn die Parität der beiden Operatoren A(t) und B(t) gleich ist ($\varepsilon_A = \varepsilon_B$), können wir noch einige Folgerungen ziehen.

$$J_{AB}(\omega) = \frac{2\,\mathrm{Im}\,G(\omega)}{e^{-\beta\omega} - 1} \qquad (A1.10)$$

BEWEIS

Für $\varepsilon_A = \varepsilon_B$ ist die Korrelationsfunktion $J_{AB}(\omega)$ reel.

Diese Formel ist von zentraler Bedeutung, da sie es erlaubt, die aus dem Experiment zugänglichen Korrelationsfunktionen durch die in der Handhabung angenehmeren retardierten Greenschen Funktionen zu ersetzen[30].

$$G(\omega) = \frac{1}{\pi} \int d\omega' \, \frac{\mathrm{Im}\,G(\omega)}{\omega' - \omega - i\epsilon} \qquad (A1.11)$$

BEWEIS

Durch Einsetzen von (A1.10)

Diese Gleichung bezeichnet man als Kramers-Kronig Beziehung,[31] wie sich durch

$$\mathrm{Re}\,G(\omega) = \frac{1}{\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} d\omega' \, \frac{\mathrm{Im}\,G(\omega')}{\omega' - \omega}$$

zeigt.

---

[30] Eine analoge Beziehung kann man auch für die zeitgeordnete Greensche Funktion herleiten.

[31] Diese Beziehungen sind ganz generelle Eigenschaften des Cauchyintegrals.

A2. ENDLICHE DREHUNG VON ATOMAREN WELLENFUNKTIONEN

In den Rechnungen des Abschnittes 3.1 ist die Quantisierungsrichtung (z-Achse) - bedingt durch die kp-Störung - die k-Richtung. Im dynamischen Strukturfaktor treten aber Matrixelemente zwischen beliebigen Richtungen im k-Raum auf. Die endlichen Drehungen von atomaren Wellenfunktionen werden durch die Drehmatrizen beschrieben, denen Edmonds in seinem Standardwerk [41] ein ganzes Kapitel gewidmet hat. (Die Formeln (A2.4) sind daraus übernommen). Bedauerlicherweise gibt er nur für die Drehimpulse j=1/2,1 explizite Ergebnisse an. Für j=3/2 finden sich nur für den Winkel $\beta=\pi/2$ Ergebnisse. Diese Drehmatrix soll im Rahmen dieses Anhangs berechnet werden.

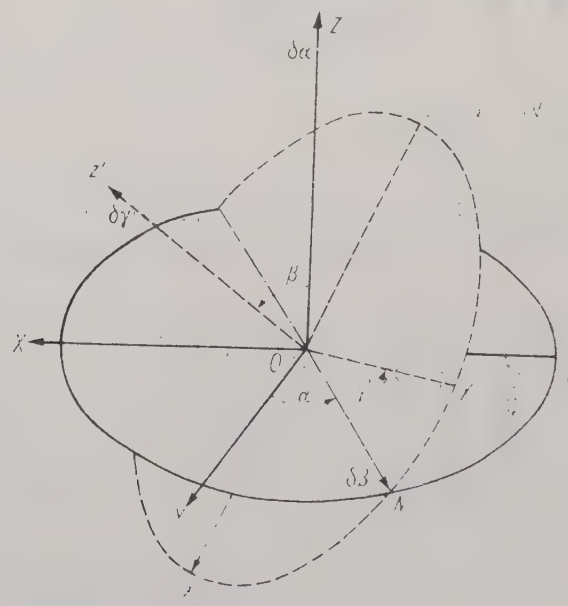


Abbildung 48.

α,β,γ sind hierbei die Eulerwinkel (siehe Abbildung 48). Die Rotationsmatrix

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{im'\alpha}\, d^{(j)}_{m'm}(\beta)\, e^{im\gamma} \qquad (A2.2)$$

$$\Psi_{jm_j}(\alpha,\beta,\gamma) = \sum_{m_j'} D^{(j)}_{m_j' m_j}(\alpha,\beta,\gamma)\, \Psi_{jm_j}(0,0,0) \qquad (A2.1)$$

ist unabhängig vom Bahndrehimpuls l, weshalb dieser in der Notation (A2.1) unterdrückt wurde.

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sqrt{\frac{(j+m')!\,(j-m')!}{(j+m)!\,(j-m)!}}\left[\cos\frac{\beta}{2}\right]^{m'+m}\left[\sin\frac{\beta}{2}\right]^{m'-m}\cdot$$

$$\cdot\, P^{(m'-m),(m'+m)}_{j-m'}(\cos\beta) \qquad \text{(A2.3)}$$

wobei $P^{\alpha,\beta}_{\gamma}(x)$ die Jacobi-Polynome sind. Man kann sich bei der Berechnung der Drehmatrizen den Weg über die Jacobi Polynome ersparen, wenn man die folgenden Symmetriebeziehungen und Rekursionsformeln benutzt.

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = d^{(j)}_{mm'}(-\beta) \qquad \text{(A2.4a)}$$

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = d^{(j)}_{-m'-m}(\beta)\cdot(-1)^{m'-m} \qquad \text{(A2.4b)}$$

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sqrt{\frac{j-m'}{j-m}}\; d^{(j-\frac{1}{2})}_{m'+\frac{1}{2},\,m+\frac{1}{2}}(\beta)\cos\frac{\beta}{2} + \sqrt{\frac{j+m'}{j-m}}\; d^{(j-\frac{1}{2})}_{m'-\frac{1}{2},\,m+\frac{1}{2}}(\beta)\sin\frac{\beta}{2} \qquad \text{(A2.4c)}$$

$$d^{(j)}_{m'j}(\beta) = (-1)^{j-m'}\sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m')!\,(j-m')!}}\left[\cos\frac{\beta}{2}\right]^{j+m'}\left[\sin\frac{\beta}{2}\right]^{j-m'} \qquad \text{(A2.4d)}$$

a) j=1/2

$$(4d) \rightarrow \quad d^{(\frac{1}{2})}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\beta) = \cos\frac{\beta}{2}$$

$$d^{(\frac{1}{2})}_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\beta) = -\sin\frac{\beta}{2}$$

(4a) ?

$m' \backslash m$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$	$\cos\frac{\beta}{2}$	$\sin\frac{\beta}{2}$
$-\frac{1}{2}$	$-\sin\frac{\beta}{2}$	$\cos\frac{\beta}{2}$

(A2.5)

b) j=1

$$d^{(1)}_{1,1}(\beta) = (-1)^0 \sqrt{\frac{2!}{2!}} \left[\cos\frac{\beta}{2}\right]^2$$

$$= \frac{1}{2}\left[1+\cos\beta\right]$$

$$d^{(1)}_{0,1}(\beta) = (-1)^1 \sqrt{2}\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta$$

$$d^{(1)}_{-1,1}(\beta) = (-1)^2 \sin^2\frac{\beta}{2} = \frac{1}{2}\left[1-\cos\beta\right]$$

$$d^{(1)}_{0,0}(\beta) = d^{(\frac{1}{2})}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\beta)\cos\frac{\beta}{2} + d^{(\frac{1}{2})}_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\beta)\sin\frac{\beta}{2}$$

$$= \cos^2\frac{\beta}{2} - \sin^2\frac{\beta}{2} = \cos\beta$$

(4a), (4b)

$m' \backslash m$	1	0	-1
1	$\frac{1}{2}(1+\cos\beta)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta$	$\frac{1}{2}(1-\cos\beta)$
0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta$	$\cos\beta$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta$
-1	$\frac{1}{2}(1-\cos\beta)$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta$	$\frac{1}{2}(1+\cos\beta)$

(A2.6)

c) j=3/2

$$d^{(\frac{3}{2})}_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}(\beta) = \sqrt{\frac{3!}{3!}}\cos^3\frac{\beta}{2}$$

$$d^{(\frac{3}{2})}_{\frac{1}{2},\frac{3}{2}}(\beta) = (-1)^1\sqrt{\frac{3!}{2!\,1!}}\cos^2\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2} = -\sqrt{3}\cos^2\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2}$$

$$d^{(\frac{3}{2})}_{-\frac{1}{2},\frac{3}{2}}(\beta) = (-1)^2\sqrt{\frac{3!}{2!\,1!}}\cos\frac{\beta}{2}\sin^2\frac{\beta}{2} = \sqrt{3}\cos\frac{\beta}{2}\sin^2\frac{\beta}{2}$$

$$d^{(\frac{3}{2})}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\beta) = \sqrt{\frac{1}{1}}\,d^{(1)}_{1,1}(\beta)\cos\frac{\beta}{2} + \sqrt{\frac{2}{1}}\,d^{(1)}_{0,1}(\beta)\sin\frac{\beta}{2}$$

(4a-4d) ?

$m' \backslash m$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$
$\frac{3}{2}$	$\cos^3\frac{\beta}{2}$	$\sqrt{3}\cos^2\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2}$	$\sqrt{3}\cos\frac{\beta}{2}\sin^2\frac{\beta}{2}$	$\sin^3\frac{\beta}{2}$
$\frac{1}{2}$	$-\sqrt{3}\cos^2\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2}$	$\cos\frac{\beta}{2}\left[\cos\beta-\sin^2\frac{\beta}{2}\right]$	$\frac{1}{2}\sin\beta\cos\frac{\beta}{2}+\cos\beta\sin\frac{\beta}{2}$	$\sqrt{3}\cos\frac{\beta}{2}\sin^2\frac{\beta}{2}$
$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{3}\cos\frac{\beta}{2}\sin^2\frac{\beta}{2}$	$-\frac{1}{2}\sin\beta\cos\frac{\beta}{2}-\cos\beta\sin\frac{\beta}{2}$	$\cos\frac{\beta}{2}\left[\cos\beta-\sin^2\frac{\beta}{2}\right]$	$\sqrt{3}\cos^2\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2}$
$-\frac{3}{2}$	$-\sin^3\frac{\beta}{2}$	$\sqrt{3}\cos\frac{\beta}{2}\sin^2\frac{\beta}{2}$	$-\sqrt{3}\cos^2\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2}$	$\cos^3\frac{\beta}{2}$

(42.7)

A3. MITNAHME VON RELAXATIONSZEITEN

Im Rahmen dieses Anhangs wird gezeigt, wie bei Berücksichtigung von Elektron-Elektron und Elektron-Phonon Wechselwirkung Relaxationszeiten eingeführt werden können. In den bisherigen Arbeiten wurde zunächst der Einbandfall [74]-[80] sowie der Mehrbandfall [80[,[81] untersucht. Eine Einbeziehung der Elektron-Phonon Kopplung fand bislang nicht statt.

Zur Einbeziehung von Relaxationszeiten in die Theorie von Abschnitt 5 gehen wir einen Weg, der sich mehr an die Boltzmanngleichung anlehnt ([74]-[82]). Wir betrachten hierbei die Suszeptibilität als die Antwort der Dichte auf ein skalares Testpotential, also (siehe Abschnitt 4)

$$H = \sum_{\lambda k} E_{\lambda k}\, c^{+}_{\lambda k}\, c_{\lambda k} + \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ kq}} U(q,t) \langle \lambda\, k+q \,|\, \lambda' k \rangle\, c^{+}_{\lambda' k+q}\, c_{\lambda' k} \qquad (A3.1)$$

In voller Analogie zu Abschnitt 4 gewinnen wir die Bewegungsgleichung für ein beliebiges Matrixelement $J_{\lambda\lambda'}(k,k+q)$ der Einteilchendichtematrix

$$\begin{aligned} \dot{J}_{\lambda\lambda'}(k,k+q) = {} & \frac{i}{\hbar}\left\{ E_\lambda(k) - E_{\lambda'}(k+q) \right\} J_{\lambda\lambda'}(k,k+q) + \\ & + \frac{i}{\hbar} \left| \langle \lambda k \,|\, \lambda' k+q \rangle \right|^2 \left\{ f_{\lambda'}(k+q) - f_\lambda(k) \right\} U(q,t) - \\ & - \gamma_{\lambda\lambda'} \left\{ J_{\lambda\lambda'}(k,k+q) - J^{ST}_{\lambda\lambda'}(k,k+q) \right\} \end{aligned} \qquad (A3.2)$$

Der letzte, phänomenologisch hinzugefügte Term erzwingt die Relaxation der Einteilchendichtematrix in die Matrix $J^{ST}_{\lambda\lambda'}(k,k+q)$. Zur Philosophie dieser Näherung ist folgendes zu sagen. Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik definiert ein Ljapunov-Funktional - nämlich die Entropie -,

das die Relaxation in das thermodynamische Gleichgewicht erzwingt. (Boltzmannsches H-Theorem). In der Nähe dieses stationären Zustandes kann das nichtlineare Funktional innerhalb der Bewegungsgleichung durch ein lineares ersetzt werden (Stoßoperator), dessen Spektrum aufgrund der asymptotischen Stabilität positiv semidefinit und reel sein muß. Das Einlaufen in den stationären Zustand ($t\to\infty$) wird dann durch den kleinsten positiven Eigenwert, die Relaxationszeit bestimmt. In der Relaxationszeitnäherung wird das gesamte Spektrum des Stoßoperators durch diesen Eigenwert ersetzt. (Für eine detaillierte Diskussion siehe zB. [74],[82]). Wir führen nun eine Fouriertransformation der Gleichung (A3.2) durch und finden mit

$$\chi^{0}_{\lambda'\lambda}(k+q,k\,|\,\omega+i\gamma_{\lambda\lambda'}) = -\left|\langle\lambda k|\lambda' k+q\rangle\right|^{2}\frac{f_{\lambda'}(k+q)-f_{\lambda}(k)}{\hbar\omega+i\hbar\gamma_{\lambda\lambda'}-E_{\lambda'}(k+q)+E_{\lambda}(k)}\,,$$

$$\chi^{0}(q\,|\,z) = \sum_{\substack{\lambda\lambda'\\ k}}\chi^{0}_{\lambda'\lambda}(k+q,k\,|\,\omega+i\gamma_{\lambda\lambda'})\,,$$

$$\delta n(q\,|\,z) = \sum_{\substack{\lambda\lambda'\\ k}}\mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(k,k+q\,|\,z)\,,$$

$$\Gamma_{\lambda\lambda'}(k,k+q\,|\,\omega+i\gamma_{\lambda\lambda'}) = \frac{i\hbar\gamma_{\lambda\lambda'}}{\delta n(q|\omega)}\;\frac{\mathcal{F}^{st}_{\lambda\lambda'}(k,k+q)}{\hbar\omega+i\hbar\gamma_{\lambda\lambda'}-E_{\lambda'}(k+q)+E_{\lambda}(k)}\,,$$

$$\Gamma(q\,|\,z) = \sum_{\substack{\lambda\lambda'\\ k}}\Gamma_{\lambda\lambda'}(k,k+q\,|\,\omega+i\gamma_{\lambda\lambda'}) \qquad (A3.3)$$

die Gleichung

$$\mathcal{J}_{\lambda\lambda'}(k,k+q|\omega) = \chi^{\circ}_{\lambda'\lambda}(k+q,k|\omega+i\gamma_{\lambda\lambda'})\,U(q,\omega) +$$

$$+ \Gamma_{\lambda\lambda'}(k,k+q|\omega+i\gamma_{\lambda\lambda'})\,\delta n(q,\omega)$$

Wir lösen diese Gleichung durch Summation und finden

$$\delta n(q,\omega) = \tilde{\chi}^{\circ}(q|z)\;U(q,\omega) \qquad (A3.4)$$

mit

$$\tilde{\chi}^{\circ}(q|z) = \frac{\chi^{\circ}(q|z)}{1-\Gamma(q|z)} \qquad (A3.5)$$

Eine naive Einführung von Relaxationszeiten würde in Gleichung (A3.4) $\tilde{\chi}^{\circ}(q,z)$ durch $\chi^{\circ}(q,z)$ ersetzen. Um die Einflüsse des stationären Zustandes zu untersuchen, betrachten wir die Funktion $\Gamma(q,z)$. Für den stationären Zustand gilt

$$0 = \dot{\mathcal{J}}^{ST}_{\lambda\lambda'}(k,k+q) = \frac{i}{\hbar}\left\{E_{\lambda}(k) - E_{\lambda'}(k+q)\right\}\mathcal{J}^{ST}_{\lambda\lambda'}(k,k+q) +$$

$$+ \frac{i}{\hbar}\,|\langle\lambda k|\lambda' k+q\rangle|^2\left\{f_{\lambda'}(k+q) - f_{\lambda}(k)\right\}\tilde{U}(q,t)$$

Durch Fouriertransformation finden wir

$$\mathcal{J}^{ST}_{\lambda\lambda'}(k,k+q) = \chi^{\circ}_{\lambda'\lambda}(k+q,k|0)\;\tilde{U}(q,\omega) \qquad (A3.6)$$

Die Teilchenzahl soll in unserem Elektronengas - es ist ja ein Fermisystem - erhalten sein. Diese Bedingung ermöglicht es uns das Potential $U(q,\omega)$ zu bestimmen.

$$\sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ k}} \mathcal{F}_{\lambda\lambda'}(k,k+q) = \delta n(q,\omega) = \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ k}} \mathcal{F}^{ST}_{\lambda\lambda'}(k,k+q) \qquad (A3.7)$$

Damit gilt dann

$$\mathcal{F}^{ST}_{\lambda\lambda'}(k,k+q) = \frac{\chi^{0}_{\lambda'\lambda}(k+q,k|0)}{\chi^{0}(q|0)} \, \delta n(q,\omega) \qquad (A3.8)$$

Wir setzen dieses Ergebnis in (A3.3) ein und finden

$$\Gamma(q|z) = \frac{1}{\delta n(q,\omega)} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ k}} \frac{i\hbar\gamma_{\lambda\lambda'} \mathcal{F}^{ST}_{\lambda\lambda'}(k,k+q)}{\hbar\omega + i\hbar\gamma_{\lambda\lambda'} - E_{\lambda'}(k+q) + E_{\lambda}(k)}$$

$$= \frac{1}{\chi^{0}(q|0)} \sum_{\substack{\lambda\lambda' \\ k}} \left[\frac{1}{1 - i\,\omega/\gamma_{\lambda\lambda'}}\right] \cdot$$

$$\cdot \left\{ \chi^{0}_{\lambda'\lambda}(k+q,k|0) - \chi^{0}_{\lambda'\lambda}(k+q,k|\omega+i\gamma_{\lambda\lambda'}) \right\} \quad (A3.9$$

In (A3.4) setzen wir wegen (5.8) das selbstkonsistente Potential

$$U(q,\omega) = U_{ext} + V_q \, \epsilon_{ph}(\omega)^{-1} \, \delta n(q,\omega) \qquad (A3.10)$$

ein, wodurch wir die Elektron-Elektron und die Elektron-Phonon Wechselwirkung in RPA berücksichtigt haben. Wir finden dann

$$\delta n(q,\omega) = \frac{\tilde{\chi}^{0}(q,z) \, \epsilon_{ph}(\omega)}{\epsilon(q,z)} \, U_{ext}$$

mit der dielektrischen Funktion

$$\epsilon(q,z) = \epsilon_{ph}(\omega) - V_q \, \tilde{\chi}^{0}(q,z) \qquad (A3.11)$$

1) Im Grenzfall verschwindender Dämpfung gewinnen wir sofort das Ergebnis (5.15) zurück, da $\tilde{\chi}^0(q,z) \to \chi^0(q,z)$ geht.

2) Ohne Berücksichtigung der Elektron-Phonon Wechselwirkung und unter der Annahme, daß sämtliche Relaxationszeiten $\tau = 1/\gamma_{\lambda\lambda'}$ gleich sind, finden wir die Ergebnisse

$$\epsilon(q,z) = 1 - \frac{V_q \, \chi^0(q|z)}{1 - \Gamma(q|z)}$$

mit

$$\Gamma(q|z) = \frac{1}{1 - i\omega\tau} \left\{ 1 - \frac{\chi^0(q|z)}{\chi^0(q|0)} \right\}$$

von Garik und Ashcroft [80]. Wenn wir bedenken, daß

$$1 - \Gamma(q|z) = \left[\frac{1}{1 - i\omega\tau} \right] \left\{ 1 - i\omega\tau - 1 + \frac{\chi^0(q|z)}{\chi^0(q|0)} \right\}$$

$$= \left[1 + {}^{i}\!/_{\omega\tau} \right]^{-1} \left\{ 1 - \frac{1}{i\omega\tau} \, \frac{\chi^0(q|z)}{\chi^0(q|0)} \right\}$$

ist, so finden wir im Einbandfall die Lindhard-Mermin Formel [78].

REFERENZEN

[1] L.Brillouin: Ann.Phys.(Paris) 17, 88(1922)

[2] A.Smekal: Naturwiss. 11, 873(1923)

[3] H.A.Kramers, W.Heisenberg: Z.Phys. 31, 681(1925)

[4] C.V.Raman: Ind.J.Phys. 2, 387(1928)

[5] G.Landsberg, L.Mandelstam: Naturwiss. 16, 57(1928)

[6] R.Enderlein, K.Peuker, F.Bechstedt: Phys.Stat.sol(b) 92, 149(1979)

[7] Doan Nhat Quang, B.Esser, R.Keiper: Phys.Stat.sol(b) 99, 103(1980)

[8] G.D.Mahan: Many-Particle Physics, Kap 1.3, Plenum (1980)

[9] R.S.Knox: Sol.State.Phys.suppl. 5(1963)

[10] D.Long: Energy Bands in Semiconductors, Interscience(1968)

[11] O.Madelung: Physics of III-V Compounds, Wiley(1964)

[12] A.Mooradian, G.B.Wright: Phys.Rev.Lett. 16,999(1966)

[13] A.Mooradian, A.L.McWhorter: in "Light Scattering Spectra of Solids", Springer(1969), S.297

[14] A.Mooradian: [13], S.285

[15] A.Pinczuk, G.Abstreiter, R.Trommer, M.Cardona: Sol.Stat.Com. 21, 959(1977)

[16] A.Pinczuk, G.Abstreiter, R.Trommer, M.Cardona: Sol.Stat.Com. 30, 429(1979)

[17] G.Abstreiter, R.Trommer, M.Cardona, A.Pinczuk: Sol.Stat.Com. 30, 703(1979)

[18] A.Pinczuk, L.Brillson, E.Burstein, E.Anastassakis: Phys.Rev.Lett. 27, 317(1971)
[19] D.Olego, M.Cardona: Sol.Sat.Com. 32, 1027(1979)
[20] D.Olego, M.Cardona: Phys.Rev. B22, 886(1980)
[21] D.Olego, M.Cardona: Phys.Rev. B24, 7217(1981)
[22] M.Cardona: Light Scattering in Solids, Springer(1976)
[23] M.Cardona: Light Scattering in Solids II, Springer(1982)
[24] S.S.Jha: Phys.Rev. 150, 413(1966)
[25] S.S.Jha: Nuovo Cimento 63B, 331(1969)
[26] B.B.Varga: Phys.Rev. 137, A1896(1965)
[27] K.S.Singwi, M.P.Tosi: Phys.Rev. 147, 658(1966)
[28] P.M.Platzman, N.Tzoar: Phys.Rev. 136, A11(1964)
[29] P.A.Wolff: Phys.Rev.Lett. 16, 225(1965)
[30] P.A.Wolff: Phys.Rev. 171, 436(1968)
[31] D.C.Hamilton, A.L.McWhorter: [13], S.309
[32] P.M.Platzman, P.A.Wolff: Sol.Stat.Phys.Suppl. 13(1973)
[33] J.E.Kardontchick, E.Cohen: Phys.Rev.Lett. 42, 669(1979)
[34] J.E.Kardontchick, E.Cohen: in "Light Scattering in Solids", Plenum(1979)
[35] K.M.Romanek, H.Nather, E.O.Göbel: Sol.Stat.Com. 39, 23(1981)
[36] A.Pinczuk, J.Shah, P.A.Wolff: Phys.Rev.Lett. 47, 1487(1981)
[37] H.Nather, R.März: wird veröffentlicht
[38] W.Richter, U.Nowak, A.Stahl: J.Phys.Soc.Jap.Suppl. A49, 703(1980)
[39] U.Nowak, W.Richter, G.Sachs: Phys.Stat.Sol.(b) 108, 131(1981)
[40] A.S.Davydov: Quantenmechanik, VEB(1978)

[41] E.Fick: Einführung in die Grundlagen der Quantenmechanik, Akad.Verlagsges.(1974)

[42] B.M.Goldberger, U.Watson: Collision Theory, Wiley (1964)

[43] G.Dresselhaus: Phys.Rev. 100, 580(1955)

[44] J.S.Blakemore: J.Appl.Phys. 53, 10(1982)

[45] J.R.Chelikowsky, M.L.Cohen: Phys.Rev. B14, 556(1976)

[46] A.Baldereschi, N.O.Lipari: Phys.Rev. B8, 2697(1973)

[47] J.M.Luttinger, W.Kohn: Phys.Rev. 97, 869(1955)

[48] J.M.Luttinger: Phys.Rev. 102, 1030(1956)

[49] A.R.Edmonds: Angular Momentum in Quantum Mechanics, Wiley(1957)

[50] F.H.Pollak, C.W.Higginbotham, M.Cardona: J.Phys.Soc.Jap.Suppl. 21, 20(1966)

[51] E.O.Kane: J.Phys.Chem.Sol. 1, 82(1957)

[51] E.O.Kane: J.Phys.Chem.Sol. 1, 249(1957)

[53] M.Combescot, P.Nozieres: Sol.Stat.Com. 10, 301(1972)

[54] C.H.Aldrich, R.N.Silver: Phys.Rev. B21, 600(1980)

[55] A.Mooradian, A.L.McWhorter: Phys.Rev.Lett. 19, 849(1967)

[56] L.D.Landau, E.M.Lifshitz: Lehrbuch der theoretischen Physik III, VEB(1979)

[57] R.Puff, G.D.Whitfield: in "Polarons and Excitons", Oliver and Boyd(1963)

[58] J.Lindhard: K.Dan.Vid.Sel.Mat.Phys.Medd. 28, 8(1953)

[59] D.N.Zubarev: Sov.Phys.Usp. 3, 320(1960)

[60] D.Pines: Elementary Excitations in Solids, Benjamin(1963)

[61] D.Pines, P.Nozieres: The Theory of Quantum Liquids, Benjamin(1966)

[63] S.Schmitt-Rink: Diplomarbeit(1979)

[64] L.D.Landau: J.Phys.(USSR). 10, 25(1946)

[65] T.H.Stix: The Theory of Plasma Waves, McGraw-Hill(1962)

[66] H.Ehrenreich, M.H.Cohen: Phys.Rev. 115, 786(1959)

[67] H.Fröhlich: Adv.Phys. 3, 325(1954)

[68] G.D.Mahan: J.Phys.Chem.Sol. 26, 751(1965)

[69] M.Gell-Mann, K.A.Brueckner: Phys.Rev. 106, 364(1957)

[70] M.V.Klein, B.N.Ganguly, P.J.Colwell: Phys.Rev. B6, 2380(1972)

[71] H.Stolz: in "Hochangeregte Halbleiter" (1980)

[72] L.L.Hirst: private Mitteilung

[73] D.N.Zubarev: Nonequilibrium Statistical Thermodynamics, Consultants Bureau(1974)

[74] H.Ehrenreich: in "The Optical Properties of Solids", Int. School "Enrico Fermi" (1965)

[75] J.Mertsching: Phys.Stat.Sol. 17, 799(1966)

[76] K.L.Kliewer,R.Fuchs: Phys.Rev. 172, 607(1968)

[77] K.L.Kliewer,R.Fuchs: Phys.Rev. 181, 552(1969)

[78] N.D.Mermin: Phys.Rev. B1, 2362(1971)

[79] R.W.Davies, F.A.Blum: Phys.Rev. B3, 3321(1971)

[80] P.Garik, N.W.Ashcroft: Phys.Rev B21, 391(1980)

[81] R.Kragler, H.Thomas: Z.Phys. B39, 99(1980)

[82] J.Jäckle: Einführung in die Transporttheorie, Vieweg(1978)

Lebenslauf

REINHARD HELLMUT MÄRZ

PERSÖNLICHE DATEN

Geburt: 25.Juli 1956 in Mailand (Italien)

Nationalität: deutsch

Familienstand: ledig

Vater: Josef Hermann Walter, Beamter

Mutter: Ingrid (geb.Krüger), Hausfrau

Apr.1963	Einschulung in die Boehleschule, Frankfurt
Dez.1963	Wechsel auf die (neue) Berthold-Otto-Schule, Frankfurt
Dez.1966	Übergang auf das (humanistische) Heinrich-von-Gagern Gymnasium, Frankfurt
Mai 1975	Abitur
Jul.1975 -Sept.1976	Wehrdienst
Okt.1975	Aufnahme in die Wöhlerstiftung
Okt.1976	Beginn des Physikstudiums an der Universität Frankfurt
Mai 1978	Vordiplom
Nov.1980	Diplom Diplomarbeit angefertigt bei Prof.Dr.H.Haug Thema: "Optische Eigenschaften von Exziton-Biexziton Systemen"

Danksagungen

Herrn Prof. Dr. H. Haug danke ich für die Aufnahme in sein Institut, die Anregung zu dieser Arbeit und für die vielen wertvollen Ratschläge, Hinweise und Diskussionen.

Mein Dank gilt ferner allen Angehörigen unseres Instituts, insbesondere Herrn Dipl.Phys. H.Nather von der Universität Stuttgart für die Bereitstellung von experimentellen Daten und die gute Zusammenarbeit.

Für die numerischen Rechnungen stand mir Rechenzeit auf der Computeranlage der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt zur Verfügung. Auf dem Textverarbeitungssystem dieser Anlage wurde diese Arbeit geschrieben.

Für das Anfertigen der zahlreichen Zeichnungen danke ich Frau Boffo.